

UNIVERSITÀ DI PISA  
SCUOLA DI INGEGNERIA



DIPARTIMENTO DI INGEGNERIA DELL'ENERGIA, DEI SISTEMI, DEL  
TERRITORIO E DELLE COSTRUZIONI

Corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Energetica

# Modellazione CFD della combustione di idrogeno per diverse applicazioni

Relatore  
Prof. Ing. Leonardo Tognotti  
Dott. Ing. Chiara Galletti

Candidato  
Greta Burchi

Anno Accademico 2013/2014

*Alla mia famiglia*

# Indice

## I

<b>INTRODUZIONE .....</b>	<b>1</b>
<b>1 L'IDROGENO E LE FIAMME DIFFUSIVE.....</b>	<b>1</b>
1.1 L'idrogeno .....	1
1.2 La combustione dell'idrogeno .....	2
1.3 Le fiamme diffusive.....	5
1.3.1 Lifted flames .....	9
1.4 Caso studio: la fiamma Cabra .....	13
1.4.1 Modellazione della fiamma Cabra .....	14
<b>2 MODELLO NUMERICO .....</b>	<b>17</b>
2.1 Dominio e griglia di calcolo.....	17
2.1.1 Richardson extrapolation.....	19
2.2 Modello fisico .....	25
2.2.1 Modelli di turbolenza.....	26
2.2.1.1 Modello k- $\epsilon$ standard .....	27
2.2.1.2 Modello k- $\epsilon$ RNG .....	28
2.2.2 Ipotesi del trasporto di gradiente.....	29
2.2.3 Meccanismi cinetici per la combustione dell'idrogeno .....	30
2.2.3.1 Meccanismo Li et al.....	31
2.2.3.2 Meccanismo San Diego .....	33
2.2.3.3 Meccanismo San Diego skeletal .....	34
2.2.3.4 Meccanismi ridotti.....	36

2.2.4	Modelli di interazione turbolenza-cinetica chimica .....	38
2.2.4.1	Eddy dissipation model (EDM) .....	41
2.2.4.2	Eddy dissipation/finite rate (ED/FR) .....	43
2.2.4.3	Eddy-Dissipation-Concept (EDC) .....	43
2.2.4.4	Modello Presumed PFD transport.....	46
	Modified Curl (MCurl) .....	46
	Euclidean Minimum Spanning Tree (EMST) .....	47
2.3	Condizioni al contorno .....	47
2.4	Parametri solutore .....	49
2.5	Simulazioni .....	50
<b>3</b>	<b>RISULTATI DELLE SIMULAZIONI .....</b>	<b>52</b>
3.1	Modelli EDM, ED/FR e EDC .....	52
3.1.1	Effetto modello di interazione cinetica-turbolenza.....	52
3.1.2	Effetto meccanismo cinetico .....	57
3.1.3	Effetto costante $C_{\epsilon 1}$ del modello di turbolenza .....	66
3.1.4	Effetto numeri di Schmidt Sct .....	74
3.1.5	Effetto modello di turbolenza.....	82
3.1.6	Effetto Multicomponent Diffusion .....	87
3.1.7	Effetto temperatura del coflow .....	93
3.2	Modified PDF transport .....	98
3.2.1	Effetto mixing models.....	98
3.2.2	Effetto mixing constant $C\phi$ .....	105
3.2.3	Effetto temperatura del coflow .....	112
<b>4</b>	<b>CONCLUSIONI.....</b>	<b>120</b>
	<b>APPENDICE 1 RICHARDSON EXTRAPOLATION .....</b>	<b>122</b>
	<b>BIBLIOGRAFIA .....</b>	<b>124</b>

---

# Introduzione

Nel presente lavoro di tesi è stato effettuato uno studio modellistico di una fiamma diffusiva alimentata a idrogeno, con particolare attenzione alla descrizione delle cinetiche chimiche e del trattamento dell'interazione tra chimica e turbolenza.

Il lavoro si colloca all'interno del progetto "Development of Zero Emission Hydrogen Combustion Cycle" cofinanziato dal Ministero dell'Ambiente e della Tutela del Territorio e del Mare (MATM) e della regione Veneto.

Il progetto si propone di sviluppare una turbina a gas alimentata a idrogeno in grado di assicurare emissioni di NOx molto basse.

L'utilizzo di idrogeno puro, o combustibili ricchi in idrogeno, all'interno di turbine a gas solleva molte sfide dal punto di vista tecnologico.

Prima fra tutte è la scelta del combustore. Combustori diffusivi sono da preferire rispetto ai premiscelati quando è utilizzato idrogeno per motivi di sicurezza, tuttavia le elevate temperature adiabatiche dell'idrogeno portano a temperature di fiamma di 100-150 K maggiori rispetto alle condizioni del gas naturale (NG), con conseguenti emissioni di NOx 3-4 volte maggiori.

In particolare, l'obiettivo di tale progetto è ideare e dimostrare che piccoli cambiamenti in un prototipo di turbina a gas da 30 MWth possono permettere di operare sugli NOx in modo sicuro e in condizioni di pieno carico nel caso di uso di idrogeno come combustibile al posto del gas naturale.

Il presente lavoro ha posto l'attenzione su una fiamma di tipo *lifted*, tipica di applicazioni industriali come bruciatori di caldaie commerciali, che presenta le caratteristiche di cinetica chimica, trasferimento di calore e trasporto molecolare simili ai bruciatori con ricircolo utilizzati nelle turbine a gas, senza la complessità del sistema turbina che porta a domini e griglie di calcolo estremamente complessi.

Queste caratteristiche hanno reso tale fiamma adatta ad effettuare studi di tipo fondamentale sugli aspetti modellistici più importanti nella combustione turbolenta di idrogeno.

La fiamma è stata totalmente caratterizzata in letteratura attraverso misure in fiamma di temperatura e specie chimiche quali radicali H, Oh e HO<sub>2</sub> in modo da fornire un accurato sistema di validazione.

Tuttavia la modellazione di una fiamma di tipo *lifted* presenta molte difficoltà note in letteratura; tra queste l'estrema sensibilità alle condizioni al contorno.

Nel presente lavoro sono confrontati diversi modelli di interazione tra cinetica chimica e turbolenza per la modellazione di fiamme turbolente, oltre a schemi cinetici globali, ridotti e

dattagliati. Inoltre è stato valutato l'effetto di modifiche di parametri quali il numero di Schmidt turbolento e l'influenza della diffusione molecolare.

Infine è stato valutato l'effetto dell'incertezza sulla temperatura del coflow sulle predizioni.

---

# 1 L'idrogeno e le fiamme diffusive

## 1.1 L'idrogeno

L'idrogeno allo stato puro è un gas incolore, inodore e insolubile in acqua. La sua molecola è composta da due atomi uniti da legame covalente, e il suo peso molecolare di 2.016 g/mol lo rende l'elemento più leggero. La sua densità a temperatura e pressione standard è circa 14 volte inferiore a quella dell'aria. L'idrogeno alla pressione atmosferica si trova allo stato liquido per temperature inferiori ai 20.3 K. Inoltre presenta il più alto contenuto energetico per unità di massa tra tutti i combustibili, circa tre volte maggiore di quello del petrolio.

Nonostante ciò, a causa della bassa densità, il suo potere calorifico su base volumetrica è circa un terzo di quello del gas naturale. Nella seguente Tabella 1.1 sono riportate le principali proprietà termofisiche dell'idrogeno.

**Tabella 1.1** Proprietà idrogeno a temperatura e pressione standard [1]

Peso molecolare	2016	
Densità	0.0838	kg/m <sup>3</sup>
Potere calorifico superiore	141.90	MJ/kg
	11.89	MJ/m <sup>3</sup>
Potere calorifico inferiore	119.90	MJ/kg
	10.05	MJ/m <sup>3</sup>
Temperatura ebollizione	20.3	K
Densità come liquido	70.8	kg/m <sup>3</sup>
Punto critico		
temperatura	32.94	K
pressione	12.84	bar
densità	31.40	kg/m <sup>3</sup>
Miscela stechiometrica in aria	29.53	vol %
Temperatura di fiamma in aria	2318	K
Coefficiente diffusione	0.61	cm <sup>2</sup> /s
Calore specifico	14.89	kJ/kgK
Temperatura autoignizione	858	K
Temperatura adiabatica di fiamma	2483	K
Velocità di fiamma laminare	28	m/s

L'idrogeno non è uno degli elementi più diffusi in natura e non è disponibile in quantità rilevanti allo stato puro ma si trova solo in composti quali l'acqua e il gas naturale. Pertanto l'idrogeno non è una fonte primaria di energia come i combustibili fossili: la sua collocazione

è piuttosto quella di fonte secondaria, analoga ai derivati del carbone e del petrolio, o di vettore energetico come l'energia elettrica.

I vettori energetici sono una forma conveniente di energia immagazzinata può essere prodotta a partire da diverse fonti, trasportata su lunghe distanze e distribuita agli utenti finali. L'idrogeno è un altro tipo di vettore energetico e se prodotto a partire da fonti pulite, costituisce un vettore pulito e versatile.

L'idrogeno liquido è già utilizzato in navette e razzi spaziali ed è anche proposto per i futuri veicoli spaziali ipersonici o supersonici. D'altronde al momento è presente un aumentato interesse da parte dei governi nello sviluppo dell'idrogeno come combustibile per altre applicazioni quali trasporto e fornitura potenze non di punta. [1]

## 1.2 La combustione dell'idrogeno

La combustione è una complessa interazione tra processi fisici e chimici.

L'analisi termodinamica permette di ricavare, dalla sola analisi dello stato iniziale e finale del sistema, numerose informazioni di interesse.

Nello studio dei problemi di combustione si fa riferimento a grandezze quali le frazioni molari, frazioni massiche e concentrazioni, al fine di valutare le proprietà fisiche medie delle miscele oggetto di studio.

L'analisi termodinamica di un processo di combustione permette di conoscere la condizione di equilibrio del sistema, ma non fornisce alcuna informazione sulla sua evoluzione dinamica. Tale analisi può essere, quindi, valida solo nell'ipotesi che le reazioni chimiche siano molto più veloci dei processi di miscelamento, conduzione del calore e diffusione. Tuttavia, in numerose applicazioni di interesse, i tempi caratteristici delle reazioni chimiche risultano paragonabili a quelli relativi al flusso e ai fenomeni di trasporto. Ciò impone la conoscenza dei meccanismi e delle velocità di reazione.

L'analisi sperimentale di molte reazioni di combustione ha evidenziato che esse non sono circoscritte a singoli atti di associazione e dissociazione di combustibili e ossidanti, ma comprendono numerosi atti elementari e un numero di specie chimiche molto elevato, anche nella combustione di combustibili molto semplici come idrogeno e metano.

Il campo di moto di combustibile e comburente e le modalità con cui si mescolano influenzano in maniera importante il processo di combustione.

Lo studio delle fiamme laminari ha portato lo sviluppo di due teorie principali che spiegano in maniera esaustiva i fenomeni che in esse avvengono: la *teoria termica*, formulata da Le Chatelier e Mallard, prevede che la miscela combustibile-ossidante sia riscaldata per conduzione dalla fiamma sino al punto in cui la temperatura raggiunta consenta alla reazione di propagarsi e la *teoria della diffusione*, formulata da Tanford e Pease, prevede che la diffusione di specie attive, come atomi e radicali, dalla zona di reazione all'interno della miscela dei reagenti, fa sì che la reazione avvenga.

Lo studio delle fiamme turbolente, sebbene sia molto più complicato, è necessario in quanto la maggior parte dei dispositivi quali motori a combustione interna, bruciatori e forni industriali opera in regime turbolento; la turbolenza incrementa i fenomeni di miscelazione



migliorando così la combustione. Anche la combustione influenza in modo significativo il campo di moto. Infatti, il forte salto di temperatura esistente fra un lato e l'altro del fronte di fiamma determina, oltre alla variazione di densità per effetto del marcato gradiente termico, anche una variazione significativa della viscosità cinematica e, quindi, del numero di Reynolds locale. La caratteristica principale di un flusso turbolento è la forte intensità dei processi di miscelamento che determina la riduzione delle disomogeneità delle grandezze scalari, quali, ad esempio, la temperatura, la concentrazione dei componenti.

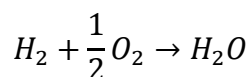
La reazione di combustione dell'idrogeno non produce anidride carbonica né altri inquinanti quali monossido di carbonio, ossidi di zolfo e ceneri; per questo motivo nella comunità scientifica internazionale si è rinnovato l'interesse nei confronti delle problematiche connesse alla produzione e alla combustione dell'idrogeno. Le uniche emissioni inquinanti sono gli ossidi di azoto e gli sforzi della ricerca sulla combustione industriale dell'idrogeno sono concentrati sulla riduzione di questo tipo di inquinanti.

La combustione dell'idrogeno è un ottimo esempio di sistema cinetico multicomponente; la temperatura adiabatica di fiamma è pari a 2400K se il comburente è aria, 3100K se è ossigeno puro. Nel primo caso i gas combusti mostrano un 95-97% di conversione ad acqua e i radicali H, O e OH costituiscono la rimanente quota. In sistemi stazionari non avviene alcuna reazione al di sotto dei 675K, mentre al di sopra degli 850K si ha esplosione spontanea all'interno di limitati range di temperatura. Alle pressioni più elevate l'esplosività è moderata dalle reazioni di terminazione della catena.

Le fiamme generate dalla combustione di idrogeno in aria non sono visibili ad occhio nudo in quanto emettono nello spettro dell'ultravioletto.

La velocità del fronte di fiamma e la diffusività dell'idrogeno sono molto maggiori rispetto a quelle degli altri idrocarburi, inoltre la cinetica di reazione risulta essere più veloce; per questi motivi nella progettazione di combustori che utilizzino idrogeno puro o miscele arricchite in idrogeno è necessario adottare particolari accorgimenti per stabilizzare la fiamma ed evitare il fenomeno del flash-back.

La reazione globale della combustione di idrogeno è



Si tratta di una reazione esotermica che necessita, per l'innesco, della presenza di radicali liberi generati dalla dissociazione termica di una molecola di idrogeno o di ossigeno.

Le miscele  $H_2$ - $O_2$  si comportano diversamente in funzione dell'intervallo di temperatura e pressione in cui vengono fatte operare. La Figura 1.1 riporta, a tal proposito, i limiti di esplosività di una miscela stechiometrica di  $H_2$ - $O_2$ .

All'interno del primo limite di esplosività, il libero cammino medio delle molecole è abbastanza lungo da permettere ai radicali O, H e OH di raggiungere ed essere distrutti in prossimità delle pareti prima di reagire con altre specie, spegnendo le reazioni di propagazione. Con l'aumento della pressione, il libero cammino medio diminuisce e i radicali iniziano a reagire con le altre specie. Alla pressione di circa 1.5mmHg e 500°C le reazioni di

propagazione della catena prevalgono su quelle di distruzione alla parete e la miscela può esplodere. Con l'aumentare della pressione oltre il primo limite di esplosività, il radicale  $\text{HO}_2$ , relativamente inerte, può reagire o essere distrutto alle pareti. Alla pressione di  $\sim 50\text{mmHg}$  le reazioni di propagazione di catena prevalgono su quelle di ramificazione e il processo di esplosione termina.

Alle maggiori pressioni di  $\sim 3000\text{mmHg}$  corrispondenti al terzo limite di esplosività, il libero cammino medio è abbastanza corto da permettere ai radicali  $\text{HO}_2$  di reagire con le altre specie.

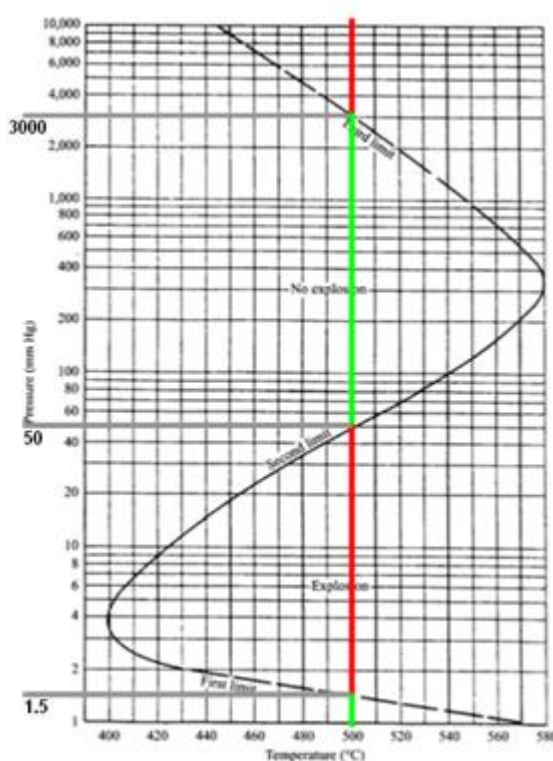


Figura 1.1 Limiti di esplosività per miscele  $\text{H}_2\text{-O}_2$  stechiometriche [2]

Una miscela stechiometrica  $\text{H}_2\text{-O}_2$  nelle condizioni standard permette lo stabilizzarsi di una fiamma perché è inizialmente portata al regime di esplosione, dopo di che la fiamma, stabilizzata grazie alla diffusione, riscalda la miscela fresca fino alla temperatura per la quale si accende. Nello stadio iniziale di ogni fiamma la miscela combustibile-aria può seguire uno schema di reazioni stazionario a basse temperature e negli ultimi stadi uno schema esplosivo. Questo fenomeno è molto significativo soprattutto nella combustione degli idrocarburi perché a livello dello stadio a bassa temperatura si ha la formazione di particolari composti inquinanti. [2]

---

## 1.3 Le fiamme diffusive

Si definisce fiamma una massa gassosa in cui avviene la combustione, che è una reazione molto esotermica e piuttosto rapida di ossidoriduzione.

Nel presente lavoro di tesi è stata presa in analisi un particolare tipo di fiamma diffusiva, chiamata *lifted* o sollevata; prima di passare alla descrizione di quest'ultima, di seguito è presentata una breve panoramica sulla classificazione delle fiamme e sulle loro caratteristiche.

Le fiamme possono essere originate da un'unica sostanza che brucia, la quale allora sarà costituita da molecole che contengono sia elementi ossidanti che riducenti; quando la sostanza inizia a decomporsi e a bruciare, spesso in modo esplosivo come nel caso della nitroglicerina, si ha lo sviluppo della fiamma. Questo tipo di combustione avviene per ossidoriduzione intramolecolare ed è quasi sempre estremamente rapida.

Nella pratica, il tipo di fiamma più diffuso è quello che si origina da combustibile e ossidante costituiti da molecole distinte che devono miscelarsi ed entrare in contatto prima di poter reagire. Ciò fa sì che l'ossidoriduzione sia intermolecolare e che la reazione proceda meno speditamente che nel caso precedente.

Una seconda distinzione delle fiamme può essere fatta in riferimento al caso in cui vi siano ossidante e combustibile distinti, in base alla concorrenza tra i processi di mescolamento e di combustione: si definiscono premiscelate quelle fiamme in cui combustibile ed ossidante vengono mescolati fino al livello molecolare prima che si inneschi la reazione chimica; mentre si definiscono diffusive le fiamme in cui i reagenti sono inizialmente separati e bruciano mentre si stanno mescolando.

Nelle fiamme premiscelate si può quindi individuare chiaramente un fronte, che è quella zona di fluido in cui si innesca la reazione e separa la porzione di fluido costituita dalla miscela fresca a monte da quella dei gas combusti a valle; lo spessore di questa zona è tanto maggiore quanto più lenta è la reazione e quanto più intenso è il trasporto convettivo - diffusivo di reagenti e prodotti.

Il fronte di fiamma si propaga verso i gas freschi con una velocità dipendente dalla combinazione dei reagenti, dalla pressione e dalla temperatura; tale velocità può essere subsonica o supersonica. Nel primo caso, si ha una deflagrazione, e cioè un consumo dei reagenti senza che la miscela venga compressa dalla fiamma. Nel secondo caso invece, la miscela viene compressa, con conseguente aumento di temperatura e della velocità di reazione: si ha una detonazione.

Contrariamente a ciò che suggerisce il nome, nelle fiamme diffusive il trasporto delle specie non è solo diffusivo, ma anche convettivo, anche se la diffusione è il meccanismo preponderante di trasporto delle specie. L'esempio classico di fiamma diffusiva laminare è quella generata da una candela. Queste fiamme sono all'incirca isobare e per esse non sono definiti né un fronte né una velocità di propagazione.

Nel caso delle fiamme a diffusione, il combustibile e l'ossigeno sono alimentati separatamente nella zona in cui avviene la reazione in modo da produrre una miscela che

comincia a bruciare immediatamente dopo essere stata formata. La fiamma appare all'interfaccia tra le zone contenenti il combustibile e l'ossigeno. I prodotti di reazione si disperdono verso entrambe le zone, generando una resistenza diffusiva al flusso dei reagenti verso il fronte di fiamma. La diffusione risulta quindi controllante ai fini della velocità globale di processo, essendo i reagenti consumati molto più velocemente di quanto riescano a rifornire il fronte di fiamma. In Figura 1.2 si riporta l'andamento tipico delle concentrazioni di reagenti e prodotti per una fiamma a diffusione.

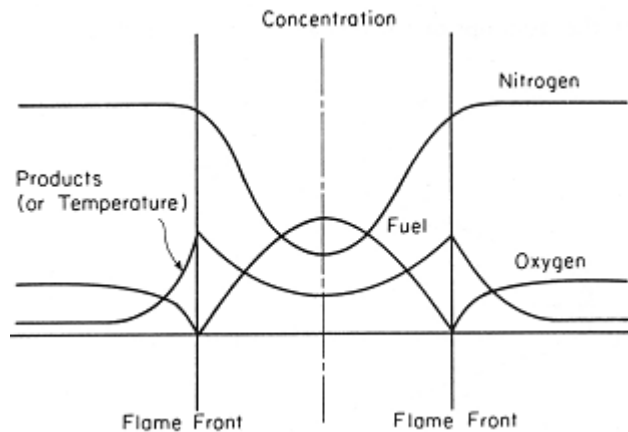


Figura 1.2 Andamento delle concentrazioni in una fiamma diffusiva

Il confine esterno della fiamma diffusiva è caratterizzato da un sensibile rilascio di calore, oltre che dalla rapida formazione di radicali e di altri prodotti intermedi della combustione, mentre spostandosi verso l'interno e verso la fine della fiamma le specie prevalenti sono i prodotti finali. La temperatura cresce progressivamente e tende asintoticamente al valore di equilibrio spostandosi verso l'estremità della fiamma.

L'analisi dei profili di concentrazione evidenzia come il rapporto di equivalenza

$$\Phi = \frac{m_{a,st}}{m_a} = \frac{(m_a/m_f)_{st}}{(m_a/m_f)} \quad (1.1)$$

vari puntualmente; spostandosi in direzione trasversale alla fiamma si passa infatti da una regione in cui la miscela è povera ( $\Phi < 1$ ) in prossimità del getto di ossidante e delimitata da una linea che rappresenta il limite povero di infiammabilità, a una regione a miscela ricca ( $\Phi > 1$ ) nelle vicinanze del getto di combustibile, delimitata da una linea che corrisponde al limite ricco d'infiammabilità, attraversando una linea stechiometrica ( $\Phi = 1$ ) come è schematizzato nella Figura 1.3.

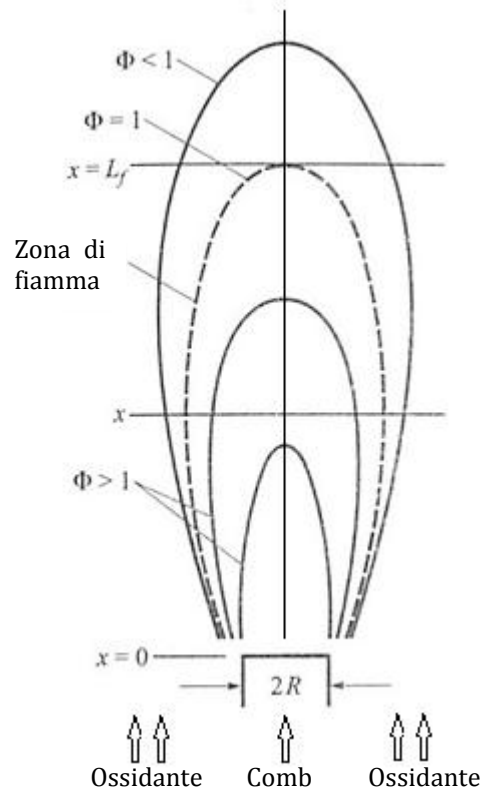


Figura 1.3 Forma di una fiamma diffusa

Un'altra classificazione delle fiamme è di tipo prettamente fluidodinamico; una fiamma può infatti essere laminare o turbolenta, a seconda del numero di Reynolds. Nel primo caso, la diffusione di quantità di moto, di calore e delle specie è prevalentemente diffusivo, mentre nel secondo caso esso è soprattutto convettivo. Esiste perciò una notevole differenza tra fiamme diffusive laminari e fiamme diffusive turbolente, in quanto in queste ultime il trasporto convettivo è favorito dalle fluttuazioni di velocità.

I suddetti confini tra le regioni a miscela povera e ricca, nel caso laminare stazionario, corrispondono effettivamente ai confini della fiamma, mentre nel caso turbolento, data l'intrinseca non stazionarietà del flusso, devono essere visti come dei confini medi. Così come le loro pendenze rispetto all'asse dipendono dai limiti di infiammabilità e dalla cinetica chimica che dipende, oltre che dalla composizione, anche da pressione e temperatura.

Si osserva inoltre che la fiamma si richiude sull'asse perché man mano che la diffusione di massa agisce, l'ossidante penetra nel getto di combustibile che così brucia sempre più in profondità.

Il punto superiore in cui la fiamma tocca l'asse è tanto più spostato verso l'alto, e quindi la fiamma più allungata, quanto maggiori sono:

- il diametro degli iniettori di ossidante e combustibile, che implicano getti massicci e quindi più difficili da mescolare;
- il numero di Reynolds e le velocità dei reagenti, in quanto le forze d'inerzia prevalendo su quelle viscosive e sulla diffusione di massa tendono a lasciare inalterati i getti, il che fa aumentare la lunghezza di fiamma;
- la pressione, che causa un ostacolo alla diffusione.

La fiamma invece risulta tanto più accorciata, quanto maggiori sono:

- la differenza tra le velocità dei due reagenti, in quanto lo strato limite, specie se turbolento, accelera il mescolamento e quindi le reazioni;
- la temperatura, che favorisce, oltre alla cinetica chimica, la diffusione di massa e il trasporto molecolare della quantità di moto. In particolare, la fiamma tende ad avere forma appuntita, quanto più la temperatura è prossima al suo valore massimo;
- i coefficienti di diffusione di tutte le specie chimiche.

Le fiamme diffusive turbolente sono caratterizzate dalla presenza di fluttuazioni e di vortici che aumentano la rapidità del trasporto di reagenti e di prodotti caldi della combustione e dallo stiramento che innalza i gradienti di concentrazioni e quindi la diffusione di massa; di conseguenza, a differenza di quelle laminari, hanno una forma più tonda ed uno spessore maggiore.

All'aumentare del numero di Reynolds, la lunghezza di fiamma aumenta sempre meno nella transizione da regime laminare a turbolento, in quanto il trasporto convettivo in direzione trasversale diventa confrontabile con quello nella direzione del flusso. La lunghezza della fiamma assume un massimo a cavallo della transizione, dopodiché decresce per assestarsi attorno ad un valore pressoché costante in regime turbolento, per via del fatto che l'effetto di mescolamento della turbolenza (che tende a ridurre i tempi e le lunghezze di diffusione e di reazione) equilibra esattamente quello dell'aumento della velocità del flusso, che tende ad allungare la fiamma, il che vale finché la turbolenza non diventa controproducente, e cioè finché essa non stira eccessivamente i filetti di fluido fino a portare la fiamma vicino all'estinzione.

Dall'analisi della Figura 1.4 si osserva che, in regime laminare, l'altezza della fiamma cresce linearmente con il flusso di combustibile. In regime turbolento, invece, l'altezza risulta costante e indipendente dalla portata di alimentazione, ad indicare un incremento della velocità di combustione dovuto alla turbolenza. In corrispondenza di valori molto elevati del flusso di alimentazione si verifica il distacco della fiamma dall'estremità del getto.

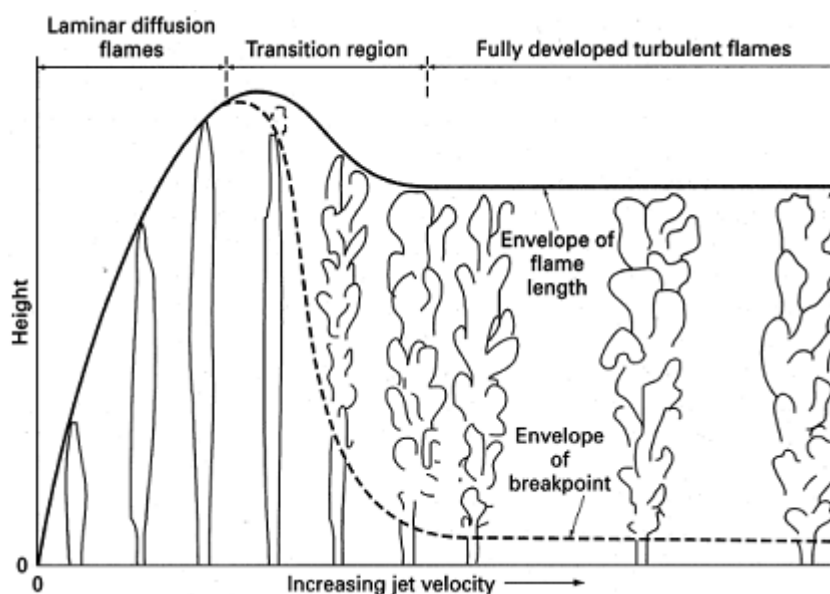


Figura 1.4 Andamento dell'altezza della fiamma all'aumentare del flusso di combustibile

Le fiamme turbolente hanno una forma sempre più frastagliata all'aumentare del numero di Reynolds, ma si mantengono abbastanza a lungo piuttosto regolari, finché, superato un valore critico del numero di Reynolds, che può essere trovato caso per caso per via sperimentale, non insorge una notevole instabilità del flusso.

Essa prende il nome di *instabilità di Kelvin-Helmholtz*, ed il flusso che ne è caratterizzato presenta continui distacchi di vortici, che ricordano le onde su una distesa d'acqua. La corrente è fortemente non stazionaria, e le ricircolazioni favoriscono la combustione. Il seguente disegno in Figura 1.5 mostra quanto detto:

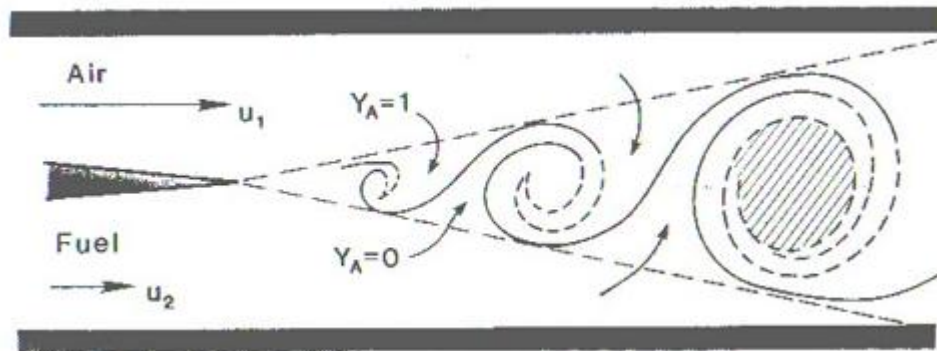


Figura 1.5 Instabilità di Kelvin-Helmholtz

Aumentando ancora il numero di Reynolds, si passa dalla precedente forma di instabilità alla cosiddetta instabilità cellulare. Quando ciò avviene, dalla fiamma principale si staccano delle bolle, dette appunto cellule, di fluido reagente, che si spostano con la corrente allontanandosi dall'asse. La turbolenza è così forte che la struttura della fiamma tende a frantumarsi in fiammelle che poi si estinguono prima del completamento della combustione, in quanto la sottrazione di materia calda diventa prevalente sulla sua produzione. Questo tipo di instabilità, che è un'evoluzione della precedente, è invece sfavorevole e prelude allo spegnimento della fiamma.

### 1.3.1 Lifted flames

La combustione in sistemi non premiscelati, come nei getti, non necessariamente comincia nella zona in cui combustibile e ossidante si mescolano e raggiungono le condizioni stechiometriche: in numerose situazioni la zona di combustione è traslata in direzione assiale rispetto all'ugello, creando così un sistema parzialmente premiscelato che si estende per diversi diametri al di sopra di esso.

Nonostante in molte applicazioni la fiamma solitamente sia ancorata all'ugello al fine di evitare instabilità che potrebbero originarsi dal campo di pressione ma anche per motivi di sicurezza nei confronti dei fenomeni di estinzione che provocherebbero l'emissione di idrocarburi incombusti e blowout, nella progettazione di alcuni bruciatori le lifted flames sono preferite qualora sia necessario proteggere il bruciatore. [3]

Le lifted flames si trovano quindi in applicazioni industriali come bruciatori di caldaie commerciali, dove è utilizzato questo tipo di fiamma per ridurre i danni al materiale del nozzle minimizzando il contatto del nozzle stesso con la fiamma. Anche la combustione di

miscele stratificate, che si ritrovano nelle turbine così come nei motori diesel a iniezione diretta o negli esplosivi da miniera, ha caratteristiche della struttura della zona di reazione che suggeriscono una comparazione con le *lifted flames* di laboratorio.

Infatti il tipo di fiamma più comune tra quelle che si propagano all'interno di una miscela stratificata di combustibile e ossidante è la *lifted flame*. La maggior parte delle fiamme industriali è di questo tipo e la stratificazione deriva dalla produzione dei volatili a partire dalle particelle di combustibile solido o dalle gocce di liquido nelle zone ricche di combustibile all'interno delle regioni di ricircolo causate dalle correnti d'aria circostanti e dalla loro successiva combustione in fase gas all'interno dello shear layer (strato in cui due correnti si incontrano, coincide col mixing layer se le correnti si mescolano al contatto).

La distanza tra il punto in cui inizia il mescolamento e la base della fiamma, in cui avviene un premiscelamento almeno parziale di combustibile ed ossidante è definita come lo spazio di distacco o *lift-off height*.

Una *lifted flame* è ottenuta quando la velocità  $u_F$  del getto di combustibile che si scarica nel coflow circostante, è aumentata al di sopra di un certo valor critico, oltre il quale la fiamma non è più stabile in corrispondenza del bordo dell'ugello e si ha il sollevamento della stessa che risulta stabilizzata senza che sia necessario l'utilizzo di alcun elemento fisico in una zona in cui la velocità del flusso si è sufficientemente ridotta da permettere l'innescio della combustione. La porzione anteriore della fiamma assume forma incavata e l'interfaccia di alta temperatura è caratterizzata da elevati gradienti di temperatura tra i gas incombusti e i prodotti di combustione caldi. Questa interfaccia solitamente demarca l'effettiva posizione della fiamma. Le zone frontali sono definite come le posizioni più a monte dell'interfaccia di alta temperatura su ogni lato rispetto al getto centrale. [4]

A partire da questa condizione, ogni ulteriore aumento della velocità del combustibile aumenta la *lift-off height*, in proporzione alla velocità di uscita; quindi il campo di realizzabilità di questa fiamma si estende in un campo di velocità al di sotto della velocità per la quale la fiamma si estingue (*blowout*).

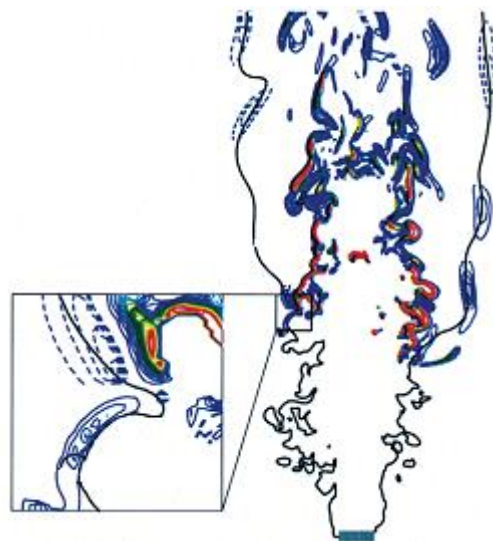


Figura 1.6 Struttura di una *lifted flame* [5]



La base della fiamma presenta quindi una struttura tubolare con i punti più bassi lontani dall'asse e di altezza direttamente proporzionale alla velocità del getto di combustibile.

In quest'area risiedono oscillazioni molto intense e di carattere casuale che complicano l'analisi del sistema. Infatti, nei primi tentativi di descrizione del meccanismo di stabilizzazione della fiamma, il principale punto di argomentazione è il grado di premiscelamento tra combustibile e ossidante nella zona a monte della base della fiamma.

La fiamma staccata può essere divisa in tre regioni:

- la prima è la zona di ancoraggio, costituita da una fiamma tripla laminare che si sviluppa all'esterno del getto di combustibile. La velocità è molto bassa ed è dello stesso ordine di grandezza della velocità  $S_L$  del fronte di una fiamma laminare premiscelata ottenuta con la stessa combinazione di reagenti nelle medesime condizioni iniziali di temperatura e di pressione;
- la seconda zona è il corpo della fiamma vero e proprio, e consiste in una fiamma premiscelata fortemente turbolenta e stabilizzata dalla fiamma tripla laminare. Essa è tanto più ricca quanto minore è la velocità del getto, per via del premiscelamento sempre meno spinto man mano che si riduce il numero di Reynolds;
- la terza zona consiste in un insieme di fiammelle che si staccano dal corpo principale per via dell'instabilità del flusso che tende a frantumarsi e dell'estinzione locale nei punti dove la miscela è troppo ricca. Queste isolette, prodotte dall'instabilità cellulare continuano a bruciare ancora per un po' grazie alla diffusione dell'ossigeno atmosferico.

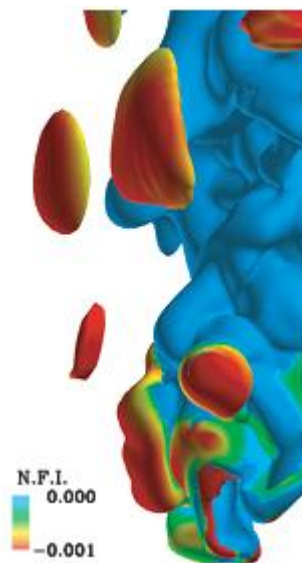


Figura 1.7 Produzione delle isole di fiammelle [5]

La velocità del flusso  $u_F$  nel punto in cui si stabilizza la fiamma dipende fortemente dal numero di Reynolds. Chiamando  $S_L$  la velocità del fronte di fiamma nel caso in cui questa è laminare e premiscelata,  $L_M$  lo spessore dello strato di mescolamento e  $L_F$  lo spessore della fiamma premiscelata, è possibile ricavare l'andamento del rapporto  $\frac{u_F}{S_L}$  con  $\frac{L_M}{L_F}$ :

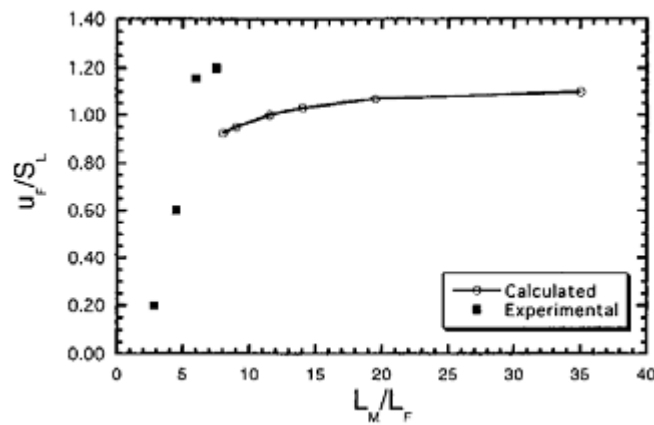


Figura 1.8 Andamento di  $\frac{u_F}{S_L}$  con  $\frac{L_M}{L_F}$  [5]

$L_M$  aumenta con il numero di Reynolds per via del sempre più rapido trasporto convettivo, per cui il grafico di Figura 1.8 può essere visto come l'evoluzione con Re della velocità del flusso nel punto di stabilizzazione della fiamma.

Da studi numerico-sperimentali si è visto che  $\frac{u_F}{S_L}$  è decisamente inferiore all'unità ai bassi numeri di Reynolds (0,2) ed aumenta fino a 1,2.

La struttura della base della fiamma dipende strettamente dal numero di Reynolds. A bassa velocità, lo spessore della fiamma è piccolo, mentre è grande la sua curvatura; ciò comporta una riduzione dell'efficacia del trasporto di calore e dei radicali verso la zona a monte della fiamma, il che di conseguenza diminuisce la velocità della reazione chimica.

Viceversa, all'aumentare della velocità, il trasporto di calore e delle specie accelera notevolmente e la fiamma diventa notevolmente più spessa. Il mescolamento sempre più veloce dei fluidi aumenta la rapidità con cui procede la combustione che  $u_F$  diventa maggiore di  $S_L$ . Quando però la velocità diventa eccessiva, il miglioramento del mescolamento non basta più a compensare la tendenza della fiamma a spegnersi, per cui si arriva bruscamente all'estinzione non appena viene raggiunta una velocità critica.

Affinché una fiamma staccata si stabilizzi è necessario quindi che vengano soddisfatte due condizioni. La prima è che il combustibile e l'ossidante siano ben mescolati ed in proporzioni prossime a quelle stechiometriche, in modo che la reazione si inneschi facilmente. La seconda è che  $u_F$  sia sensibilmente inferiore a  $S_L$ . [5]

Fondamentalmente, queste fiamme sono di interesse in quanto sistemi semplici che esibiscono caratteristiche importanti quali chimica *finite-rate*, interazione tra turbolenza e chimica, effetti di rilascio di calore ed estinzioni locali. Unita al fascino di una fiamma che si stabilizza senza la presenza di supporti (bordature del bruciatore, stabilizzatori e simili), la loro semplicità permettono di unire la modellazione agli sforzi sperimentali nella ricerca attuale per sviluppare codici predittivi della combustione turbolenta, per questo motivo hanno suscitato molta attenzione negli ultimi 50 anni.

Definire fino a che punto la fiamma possa essere trattata come se la propagazione avvenisse in un gas completamente miscelato, è uno dei maggiori settori di ricerca sulle *lifted flames*.

Di conseguenza il problema principale risiede nel far rientrare le *lifted flames* nella categoria delle fiamme premiscelate, per cui si ha stabilizzazione lungo il profilo della miscela

stechiometrica media nel punto in cui la velocità assiale locale del flusso si accorda con la velocità turbolenta della fiamma, oppure nella categoria delle *flamelet* laminari non premiscelate, per cui la fiamma si stabilizza quando lo sforzo di taglio lungo le superfici stechiometriche istantanee scende al di sotto del valore di estinzione delle flamelet. [6]

Talvolta, queste fiamme sono erroneamente classificate come parzialmente premiscelate, termine riservato a situazioni in cui è presente un miscelamento imperfetto prima dell'uscita del combustibile o dell'iniezione dell'aria. Secondo questa definizione, tale miscelamento è quello che avviene a monte del fronte di fiamma, potendone definire uno. Il miscelamento può essere parziale sia nello spazio che nel tempo, quindi la fiamma dovrebbe essere descritta più precisamente come parzialmente miscelata. Un miscelamento parziale nello spazio implica un flusso di tipo stratificato se il miscelamento avviene in direzione trasversale rispetto al flusso o un miscelamento imperfetto lungo la direzione del flusso; un miscelamento parziale nel tempo è invece associato a un carattere di intermittenza. [4]

La stabilità delle zone di reazione è anch'essa un aspetto di primaria importanza nello studio della combustione e nel caso delle *lifted flames*, l'obiettivo è capire le condizioni in cui la fiamma si stabilizza e le cause ad esse associate.

Gli attuali approcci nel campo della ricerca si basano sul fatto che tale comprensione possa scaturire dalla conoscenza dei parametri scalari e dinamici in una struttura appropriata che permette di riunire contributi numerici, teorici ed empirici in valide teorie meccanicistiche.

I primi studi sulle *lifted flames* vedevano la turbolenza necessaria per la stabilizzazione della fiamma. La maggior parte delle *lifted flames* sono infatti turbolente e l'esistenza della condizione di isteresi<sup>1</sup> per queste fiamme è consistente con tale affermazione.

## 1.4 Caso studio: la fiamma Cabra

Questo tipo di fiamma è tipico di un vasto range di campi di applicazione quali combustori per turbine a gas e bruciatori di tipo commerciale. In molti sistemi di combustione di tipo pratico, infatti, il getto di combustibile si sviluppa all'interno di un ambiente caldo formato dagli ossidanti e dai prodotti di combustione; grazie alla ricircolazione dei prodotti di combustione, caldi, il getto di combustibile si autoignisce ed è stabilizzato.

Il design consiste in una fiamma a getto con flusso coassiale di prodotti di combustione caldi da una fiamma premiscelata povera. Il flusso reagente, composto da una miscela di idrogeno e azoto, che si sviluppa nel getto centrale presenta le caratteristiche di cinetica chimica, trasferimento di calore e trasporto molecolare simili ai bruciatori con ricircolo ma senza i complessi meccanismi fluidodinamici che implica il ricircolo.

---

<sup>1</sup> In una *lifted flame* si assiste al fenomeno di isteresi quando l'innalzamento della zona di reazione è causato dal raggiungimento di una velocità critica del getto, trovata aumentando tale velocità a partire da un valore arbitrario, ma al fine di ottenere un riattaccamento della fiamma la velocità del getto deve essere fatta scendere al di sotto di questo valor critico, in corrispondenza del quale una fiamma si può ignire e stabilizzarsi nelle vicinanze dell'uscita del getto ma una volta che è sollevata più in alto a causa di un aumento di velocità, non è in grado di tornare al punto di stabilizzazione inferiore nonostante una diminuzione della velocità

Le condizioni al contorno sono ben definite e di tipo uniforme mentre il design di tipo coassiale semplifica la struttura del flusso, queste sono le principali caratteristiche che rendono questo tipo di fiamma molto interessante dal punto di vista della modellazione numerica.



Figura 1.9 Flame drawing [7]

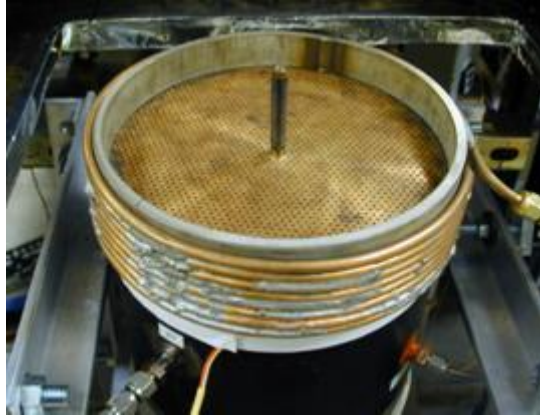


Figura 1.10 Burner with spray nozzle installed [7]

Il diametro del coflow è molto più grande di quello dell'ugello centrale, che si trova così a una distanza dall'aria esterna sufficiente da poterlo considerare isolato e di conseguenza ridurre il problema computazionale a un flusso con due correnti.

Inoltre il bruciatore con coflow viziato permette investigazioni sperimentali e computazionali dettagliate dei fenomeni di miscelamento turbolento e stabilizzazione della fiamma, mentre evita le complessità che implicano le dinamiche di ricircolazione dei fluidi riscontrate nei combustori reali o nei bruciatori swirlati in scala da laboratorio [7].

### 1.4.1 Modellazione della fiamma Cabra

Le *lifted flames* turbolente all'interno di un ambiente caldo sono state e sono tutt'ora oggetto di intenso studio a causa della loro importanza nelle applicazioni di interesse pratico.

Tipicamente, gli esperimenti sulle *lifted flames* turbolente sono condotti con getti di combustibile in aria fredda, dove l'aria è quiescente o all'interno di un coflow a bassa velocità. Il campo di flussi che possono essere studiati è limitato in quanto piccoli incrementi della velocità dell'aria del coflow possono provocare l'estinzione della fiamma. Negli studi sulle fiamme turbolente, questa limitazione della stabilità della fiamma è spesso aggirata mediante l'utilizzo di fiamme pilota, che porta però all'introduzione di una terza corrente e a una disuniformità del fluido attraversato dal getto.

Il coflow viziato svolge la funzione di una grande fiamma pilota fornendo d'altra parte un ambiente uniforme per l'investigazione di fiamme altamente turbolente con bassi numeri di

Damköhler. Questo rende le *lifted flames* con un coflow viziato interessanti dal punto di vista dell'analisi computazionale.

Attraverso la diagnostica con laser multi scalare (multiscalar laser diagnostics) Cabra et al. [8] hanno confermato l'uniformità delle proprietà del coflow all'interno di tutto il dominio di calcolo; questo permette di esaminare il miscelamento turbolento e le cinetiche chimiche di interesse per la modellazione di combustori avanzati senza i complessi meccanismi di ricircolazione.

Per poter sviluppare nuovi dispositivi o migliorare i sistemi di combustione convenzionali per le fiamme a idrogeno devono quindi essere approfonditi i concetti fondamentali per la progettazione di un bruciatore quali il meccanismo di stabilizzazione della fiamma e il ruolo della cinetica chimica.

Masri et al. [9] hanno indagato il ruolo del miscelamento in metodi PDF cercando anche un modello di turbolenza che riportasse con fedeltà, rispetto ai valori sperimentali, i risultati delle simulazioni; aumentando la costante relativa al miscelamento e quindi la velocità hanno notato una riduzione delle fluttuazioni dei valori rms, nonché una leggera diminuzione dell'altezza di sollevamento. Questa caratteristica è risultata invece essere molto sensibile al meccanismo cinetico chimico utilizzato.

Questo è stato successivamente confermato da Cao et al. [10] che hanno utilizzato modelli di miscelamento e meccanismi diversi dai precedenti ma riscontrato la medesima sensibilità e da Wang [11] attraverso le animazioni delle traiettorie delle particelle fluide ottenute dai diversi modelli di miscelamento. Le animazioni hanno permesso di rilevare come il moto iniziale delle particelle sia dovuto principalmente al miscelamento, mentre allontanandosi dall'uscita dell'ugello si ottiene una miscela parzialmente premiscelata e quando alcune particelle cominciano a accendersi, bruciando e mescolandosi con le adiacenti provocano un aumento della temperatura e in questo modo promuovono l'ignizione del resto delle particelle.

Di conseguenza è chiaro come la cinetica chimica e il miscelamento giocano entrambi un ruolo importante.

Najafizadeh [12] ha indagato le strutture chimiche che favoriscono e innescano l'ignizione individuando la reazione di ramificazione (chain-branching) responsabile del fenomeno e la reazione la cui importanza aumenta in prossimità della base della fiamma in quanto legata alla produzione delle specie radicaliche che favoriscono i processi di ramificazione. In particolare, gli stessi autori hanno anche studiato l'influenza delle variazioni delle caratteristiche del coflow sulla fiamma stessa [13]. Un aumento della temperatura del coflow provoca uno spostamento del punto di ignizione che si avvicina all'uscita dell'ugello; queste variazioni sono state riscontrate per variazioni di temperatura che rientrano all'interno dell'incertezza sperimentale e in particolare alle minori temperature. La struttura della zona di reazione è molto dipendente dalla concentrazione di  $O_2$  e la luminosità della fiamma diminuisce sostanzialmente con il diminuire di tale specie. La presenza di vapor d'acqua nel coflow provoca una notevole diminuzione dell'altezza di sollevamento rispetto al caso di flusso ossidante composto da aria. L'ultimo parametro che è stato fatto variare è il rapporto di equivalenza; l'altezza di sollevamento si è rilevata estremamente sensibile anche

a questo parametro mostrando un comportamento analogo al caso delle variazioni della temperatura del coflow.

Non sono mancati degli studi di raffronto con flussi non reattivi come quello condotto da Wu [14] o con altre fiamme di laboratorio da parte di Wang e Pope [15].

In queste situazioni applicative, alcuni degli esistenti modelli di combustione non producono una accurata predizione dell'altezza di lift-off della fiamma e di conseguenza la comprensione dei meccanismi di stabilizzazione che governano la fiamma diventa difficoltosa.

La predizione di fiamme turbolente con complessi flussi ricircolatori e meccanismi di autoignizione costituisce tutt'oggi una sfida per la modellazione della combustione.

Infatti, in un primo momento, questo tipo di fiamma può sembrare relativamente semplice da modellare come le più comuni fiamme non premiscelate, ma le condizioni di elevate distribuzioni di temperatura non uniformi e i bassi livelli di concentrazione di ossigeno nel coflow sono le cause di una bassa velocità di reazione e di un incremento della diffusione molecolare all'interno della fiamma.

---

## 2 Modello numerico

### 2.1 Dominio e griglia di calcolo

Il bruciatore sperimentale consiste in un ugello per il getto del combustibile con un diametro interno di 4.57 mm e uno spessore di parete pari a 0.89 mm posto al centro di una piastra perforata del diametro di 210 mm che fornisce un coflow caldo e uniforme. Esterno al coflow è presente un collare d'aria. L'uscita dell'ugello si trova a una distanza di 70 mm al di sopra della superficie della piastra perforata.

Il diametro del coflow, essendo molto più grande rispetto a quello del getto di combustibile, rende quest'ultimo isolato dalla presenza del collare d'aria esterno che risulta non influenzare in maniera apprezzabile la fiamma. Alla luce di quanto appena detto si è deciso di trascurare il flusso esterno d'aria per quanto riguarda la generazione del dominio e di conseguenza il problema computazionale è stato ridotto a un flusso coassiale costituito da due correnti.

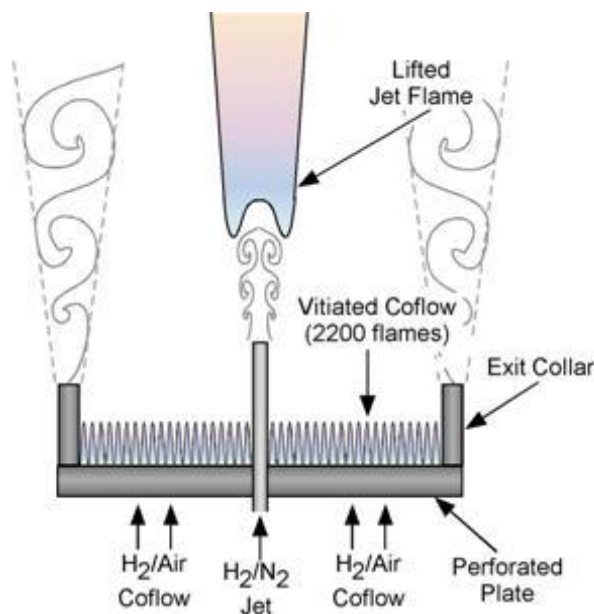


Figura 2.1 Schema bruciatore [8]

Vista la forma cilindrica della struttura, ne sono state sfruttate le caratteristiche di simmetria scegliendo un dominio di tipo bidimensionale (300x105 mm) e assialsimmetrico rispetto all'asse x, mentre l'asse y è stato scelto per indicare la posizione radiale.

Il dominio scelto comprende i 70mm di lunghezza dell'ugello, si estende per 230mm in direzione assiale a valle dell'uscita del getto e per 105mm in direzione radiale

comprendendo tutto il coflow, ed escludendo il collare esterno d'aria per quando precedentemente detto.



Figura 2.2 Dominio di calcolo



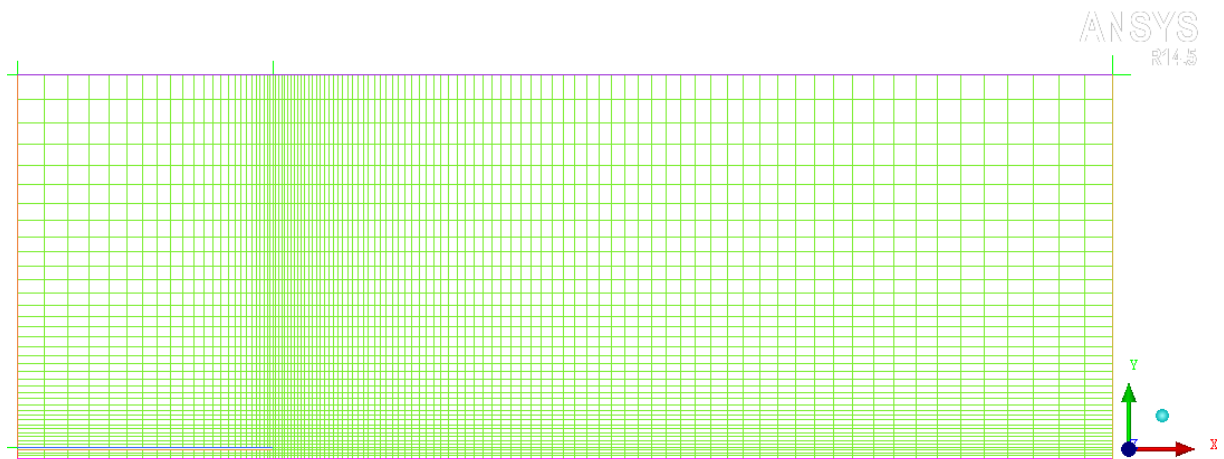
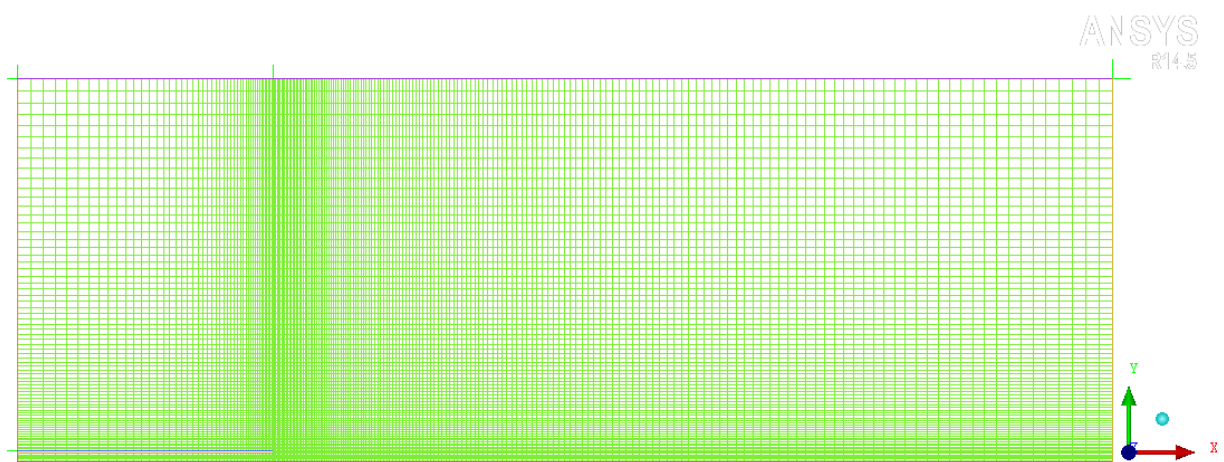
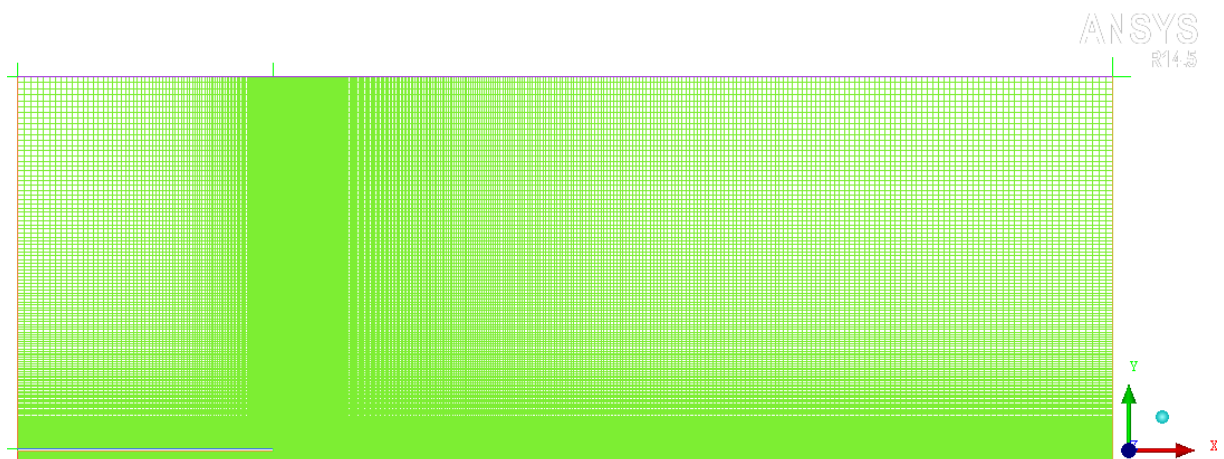
Figura 2.3 Particolare della zona dell'ugello del dominio di calcolo

A questo punto il dominio è stato suddiviso in 5 blocchi. La discretizzazione lungo la direzione assiale consiste in due edges, uno a monte e l'altro a valle dell'uscita del getto, che sono stati divisi secondo una progressione geometrica imponendo a monte che la prima cella risulti essere dieci volte più grande dell'ultima e viceversa a valle. Per quanto riguarda la discretizzazione lungo la direzione radiale, per gli edges corrispondenti all'interno del getto e allo spessore della parete dell'ugello la spaziatura è stata imposta di tipo uniforme viste le ridotte dimensioni di 2.285 mm e 0.872 mm rispettivamente, mentre per l'edge corrispondente al coflow (101.843 mm) è stata nuovamente scelta una spaziatura geometrica con dimensione delle celle crescente con  $y$ . In questo modo è stato possibile ottenere un infittimento in corrispondenza dell'uscita del getto che sarà anche la zona di maggiore interesse delle simulazioni.

Mediante l'utilizzo del software per la progettazione grafica vettoriale ANSYS® ICEM CFD™ sono state generate tre griglie raddoppiando ogni volta in numero di celle in cui è suddiviso l'edge del getto partendo da 3 celle e arrivando a 12 celle e mantenendo allo stesso tempo il rapporto di proporzionalità geometrica degli edges filtrati in maniera non uniforme. In questo modo è stata generata una prima griglia *coarse* formata da 4242 celle, una intermedia *medium* con 6 celle nell'edge del getto e un totale di 16476 celle e una terza griglia *fine* da 64584 celle.

Sulla base di queste è stata condotta un'estrapolazione col metodo Richardson [16] al fine di verificarne la bontà.



Figura 2.4 Griglia *coarse*Figura 2.5 Griglia *medium*Figura 2.6 Griglia *fine*

### 2.1.1 Richardson extrapolation

Nel 1986, da parte dei direttori della divisione Fluids Engineering dell'ASME è stata pubblicata una breve linea guida [Roache et al 1986] riguardante la necessità di rivolgere attenzione al problema della quantificazione dell'accuratezza numerica.

Infatti griglie poco buone accrescono il valore dell'errore di discretizzazione ma non aggiungono nuovi termini; questo non significa che una griglia possa essere buona come

un'altra o che una griglia molto poco buona non possa amplificare gli errori, ma che i cosiddetti errori di generazione della griglia non devono essere considerati separatamente rispetto agli altri errori di discretizzazione durante l'analisi di convergenza e indipendenza della griglia.

Studi sistematici di convergenza della griglia sono i più comuni, inequivocabili e verosimilmente costituiscono la tecnica di quantificazione dell'incertezza numerica più affidabile. A differenza di altri metodi, questo approccio può essere utilizzato per considerare in modo affidabile la convergenza di qualsiasi quantità di interesse così come le solitamente utilizzate norme  $L_2$  e  $L_\infty$ . [16]

L'esame della convergenza spaziale di una simulazione è un metodo immediato per determinare l'errore di discretizzazione introdotto in una simulazione CFD (Computational Fluid Dynamics). Tale metodo consiste nella simulazione su due o più griglie computazionali con affinamento crescente. Con la crescita del grado di affinamento della griglia e la riduzione del time step, gli errori di discretizzazione spaziale e temporale dovrebbero tendere asintoticamente a zero, a meno di errori di arrotondamento da parte del calcolatore.

L'approccio più semplice per la generazione del set di griglie è generare una prima griglia, che sarà quella con la più piccola spaziatura, successivamente le griglie più lasche possono essere ricavate mediante la rimozione delle edges dispari in ogni direzione. Questo procedimento può essere ripetuto al fine di creare livelli aggiuntivi di griglie più leggere. In seguito alla generazione della griglia fine, possono essere costruiti  $n$  livelli di griglie più lasche dal momento che il numero di punti della prima griglia lungo ogni coordinata deve soddisfare la relazione

$$N = 2^n m + 1 \quad (2.1)$$

dove  $n$  è il numero di griglie generate a partire dalla prima e  $m$  è un intero. Non è necessario dimezzare il numero dei nodi della griglia lungo ciascuna coordinata per ottenere le griglie più lasche: può essere effettuato un infittimento o un diradamento della griglia non intero a patto che siano mantenuti gli stessi parametri al momento della generazione della

nuova griglia. Il rapporto di affinamento della griglia  $r_h = \frac{h_2}{h_1}$  deve essere almeno 1.1 in modo da permettere di distinguere l'errore di discretizzazione dalle altre sorgenti di errore quali gli errori di convergenza iterativi e di arrotondamento del calcolatore.

Per il caso studio le griglie generate sono tre e quindi  $n=2$  e  $m$  è stato preso diverso nelle due direzioni  $m_x=39$  e  $m_y=102$ .

L'ordine di convergenza della griglia coinvolge il comportamento dell'errore della soluzione definito come la differenza tra la soluzione discreta e quella esatta

$$E = \phi(h) - \phi_{exact} = Ch^p + H.O.T \quad (2.2)$$

dove  $C$  è una costante,  $h$  è la misura della spaziatura della griglia e  $p$  è l'ordine di convergenza.

I codici CFD utilizzano algoritmi numerici che prevedono un ordine teorico di convergenza, ma le condizioni al contorno, i modelli numerici e la griglia stessa riducono tale ordine producendo un ordine osservato di convergenza che sarà minore.

Una valutazione diretta di  $p$  può essere ottenuta dalle soluzioni calcolate con tre griglie con rapporto di affinamento  $r_h$  costante

$$p = \frac{\log\left(\frac{\phi_3 - \phi_2}{\phi_2 - \phi_1}\right)}{\log(r_h)} \quad (2.3)$$

L'ordine di accuratezza è determinato dall'ordine del termine massimo dell'errore di troncamento  $\tau_h$  ed è rappresentato rispetto alla scala di discretizzazione  $h$ .

L'estrapolazione di Richardson è un metodo per ottenere la stima del valore sul continuo a partire da una serie di valori discreti ottenuti con metodi di ordine inferiore. Le soluzioni discretizzate  $\phi$  sono assunte con una rappresentazione in serie rispetto alla spaziatura della griglia  $h$

$$\phi = \phi[exact] + g_1 h + g_2 h^2 + g_3 h^3 + \dots \quad (2.4)$$

in cui le funzioni  $g_i$  ( $i=1,2,\dots$ ) sono definite nel continuo e non dipendono da alcuna discretizzazione. Per un metodo del secondo ordine deve essere  $g_1=0$ ; l'idea è combinare due separate soluzioni discrete  $\phi_1$  e  $\phi_2$  ottenute dalla soluzione derivante da due diverse griglie con discretizzazioni  $h_1$  e  $h_2$  trascurando i termini di ordine superiore al secondo in modo da eliminare i termini di propagazione dell'errore e ottenere una più corretta stima della soluzione esatta  $\phi[exact]$ :

$$\phi = \phi[exact] + \frac{h_2^2 \phi_1 - h_1^2 \phi_2}{h_2^2 - h_1^2} + H.O.T. \quad (2.5)$$

Utilizzando il rapporto di affinamento della griglia  $r_h$  questo risultato può essere convenientemente espresso in termini della soluzione della griglia più fitta  $\phi_1$  trascurando i termini di ordine superiore H.O.T.

$$\phi[exact] \cong \phi_1 + \frac{\phi_1 - \phi_2}{r_h^2 - 1} \quad (2.6)$$

L'estrapolazione di Richardson può essere poi generalizzata per un metodo di ordine  $p$

$$\phi[exact] \cong \phi_1 + \frac{\phi_1 - \phi_2}{r_h^p - 1} \quad (2.7)$$

L'uso più comune di questo metodo si riscontra per il raddoppiamento o dimezzamento delle griglie ( $r=2$ ) nei quali rientra anche il presente caso studio. [17]

L'estrapolazione è da utilizzare con una certa cautela dal momento che coinvolge l'assunzione di convergenza monotona dell'errore di troncamento nella mesh con spaziatura  $h$ . Questa assunzione può non essere più valida per griglie meno fitte. Inoltre, l'estrapolazione amplifica gli errori di approssimazione della macchina e di incompleta

iterazione. Al di là di queste puntualizzazioni, l'uso di questo metodo è estremamente conveniente se paragonato alla formulazione e risoluzione diretta di discretizzazioni del quarto ordine; infatti il metodo è inconsapevole della discretizzazione dell'equazione e della dimensionalità del problema e può essere facilmente applicato come post processor alle soluzioni relative a due griglie senza riferimento ai codici, algoritmi o equazioni di bilancio che hanno prodotto la soluzione a condizione che le soluzioni originali abbiano accuratezza del secondo ordine.

Un aspetto importante dell'estrapolazione di Richardson è l'applicabilità a soluzioni funzionali oltre che ai valori della soluzione punto per punto, a condizione che in tali valutazioni siano utilizzati metodi consistenti o di alto ordine così come deve essere presente l'assunzione di base che l'ordine del metodo è applicabile globalmente così come localmente.

Un significativo, ma spesso sorvolato, svantaggio è che la soluzione estrapolata è generalmente non conservativa. [16]

Per riportare i tests di convergenza delle griglie in maniera consistente deve essere utilizzato l'indice di convergenza della griglia (Grid Convergence Index) GCI che può essere fatto per una coppia di griglie e quindi di soluzioni anche se sono raccomandati tre livelli in modo da stimare con cura l'ordine di convergenza e verificare che la soluzione sia compresa nel rane asintotico di convergenza.

Una analisi numerica consistente fornisce dei risultati che si avvicinano al valore effettivo col tendere a zero della risoluzione della griglia; perciò le equazioni discretizzate tenderanno alla soluzione delle equazioni effettive del problema differenziale. Un importante aspetto nella computazione numerica è stabilire quale sia il livello di risoluzione della griglia più adeguato; questo è funzione delle condizioni del flusso, del tipo di analisi, delle geometria e di altre variabili. Lo studio dell'indipendenza della griglia solitamente inizia da un livello di risoluzione per poi avanzare secondo una serie di affinamenti al fine di valutarne l'effetto sulle variabili calcolate.

Deve essere fatta una distinzione tra un risultato numerico che si avvicina a un valore numerico asintotico e uno che tende alla soluzione vera; l'aspettativa è che col l'affinarsi della griglia e l'aumento della risoluzione, la soluzione calcolata non subisca significativi cambiamenti e tenda ad un valore asintotico (i.e. la vera soluzione numerica). Può comunque essere presente un errore tra il valore asintotico e la vera soluzione fisica delle equazioni alle differenze parziali.

Roache ha fornito un metodo per uniformare la presentazione degli studi di indipendenza della griglia, l'idea base è collegare in maniera approssimata i risultati di ogni affinamento della griglia con i risultati ottenuti da un raddoppiamento (o dimezzamento) della griglia ottenuto seguendo un metodo del secondo ordine. L'indice di convergenza della griglia GCI si basa su una stima dell'errore di affinamento della griglia ed è una misura in termini percentuali di quanto la soluzione calcolata sia lontana dal valore numerico asintotico; indica quindi quando la soluzione potrebbe variare in seguito ad ulteriori affinamenti della griglia. Tale indicazione è fornita attraverso bande di errore sulla soluzione calcolata e un piccolo valore del GCI indica che il calcolo risiede all'interno del range asintotico.

Il GCI per la griglia più fine è definito come

$$GCI_{fine} = \frac{F_s \cdot |\varepsilon|}{(r^p - 1)} \quad (2.8)$$

dove  $\varepsilon$  è l'errore relativo  $\varepsilon = \frac{\phi_2 - \phi_1}{\phi_1}$  e  $F_s$  è un fattore di sicurezza il cui valore raccomandato è 3 nel caso di comparazione tra due griglie, mentre per il confronto di tre o più griglie assume valore pari a 1.25.

Quando una progettazione o una analisi richiedono un numero elevato di simulazioni CFD, può essere necessario l'uso della griglia meno fitta e quindi è necessario quantificare l'errore di tale griglia:

$$GCI_{coarse} = \frac{F_s \cdot |\varepsilon| \cdot r^p}{(r^p - 1)} \quad (2.9)$$

È importante che ogni livello della griglia produca soluzioni che si trovino all'interno del range asintotico di convergenza per la soluzione calcolata. [17]

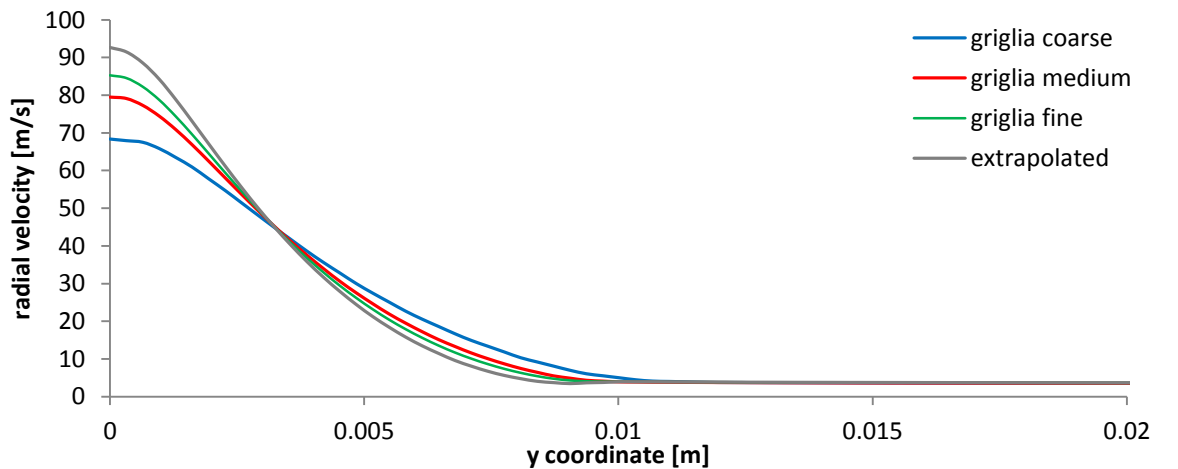
Questo può essere verificato osservando che i due valori del GCI calcolati su tre griglie seguono la relazione

$$GCI_{23} = r^p \cdot GCI_{12}. \quad (2.10)$$

Di seguito in Figura 2.7 si riportano i profili della velocità radiale alla porta  $x/d=8$  (con  $d=4.57$  mm pari al diametro interno dell'ugello) ottenuti con le tre griglie generate per il dominio del caso studio assieme all'andamento del valore estrapolato con metodo Richardson.

Nella successiva Figura 2.8 è riportato il profilo della velocità radiale alla porta  $x/d=8$  ottenuto con la griglia fine e le relative bande di errore ottenute secondo la precedente formulazione  $GCI_{fine}$ .

I medesimi calcoli sono stati effettuati per le velocità radiali alle distanze assiali  $x/d=1, 9, 10, 11, 14, 26$  e per la velocità assiale; per i grafici ottenuti si rimanda all'Appendice 1.



**Figura 2.7** Profili velocità radiale delle tre griglie e velocità radiale estrapolata con metodo Richardson per  $x/d=8$

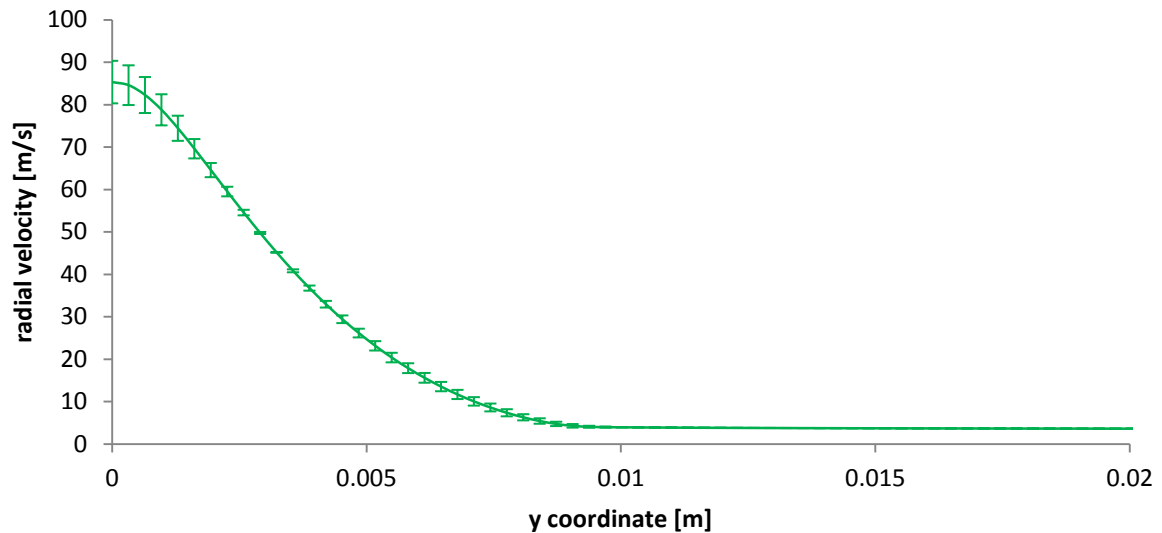


Figura 2.8 Profilo velocità radiale griglia *fine* e relative bande di errore  $GCI_{fine}$

Infine, per le successive simulazioni a caldo è stata generata una quarta griglia con livello di infittimento intermedio alla *medium* e alla *fine*, in quanto la prima risultava avere un numero di celle troppo basso e quindi dimensione delle celle troppo grande mentre la seconda aveva un numero di celle troppo elevato che avrebbe aumentato il costo computazionale delle simulazioni senza introdurre benefici significativi in termini di precisione della soluzione.

Per la griglia finale sono stati mantenuti gli stessi parametri costruttivi utilizzati per le altre partendo questa volta dalla suddivisione dell'edge del getto in 9 celle; in questo modo le celle totali sono 36576 risultando un ottimo compromesso tra precisione della soluzione e sforzo computazionale.

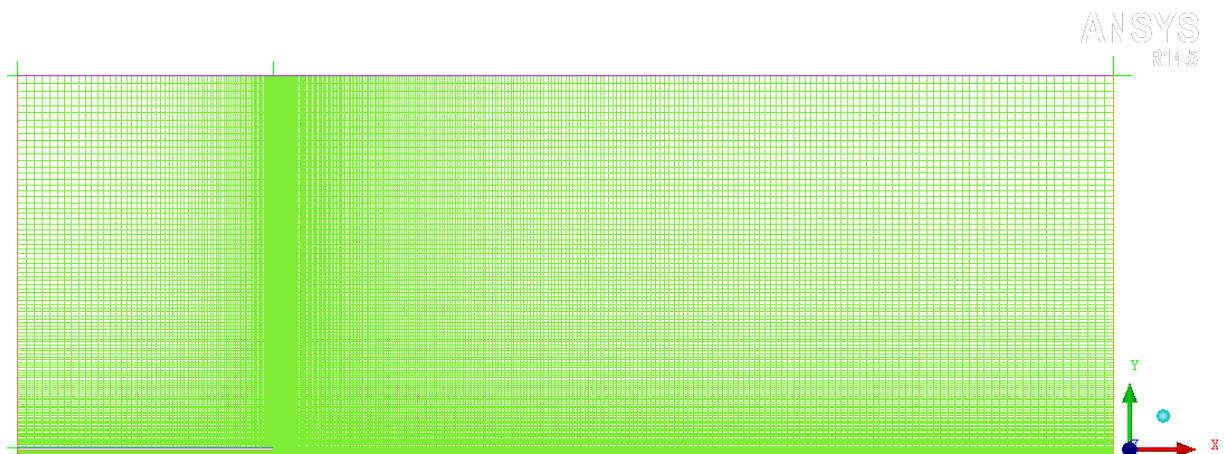


Figura 2.9 Griglia finale

In Figura 3.2.10 si può osservare come l'andamento del profilo della velocità radiale alla quota assiale pari a  $x/d=8$  sia in concordanza con quelli precedentemente ottenuti dalle griglie *fine*, *medium* e *coarse*; per questo motivo la griglia finale può essere considerata valida alternativa alla *fine* permettendo di risparmiare i tempi computazionali.

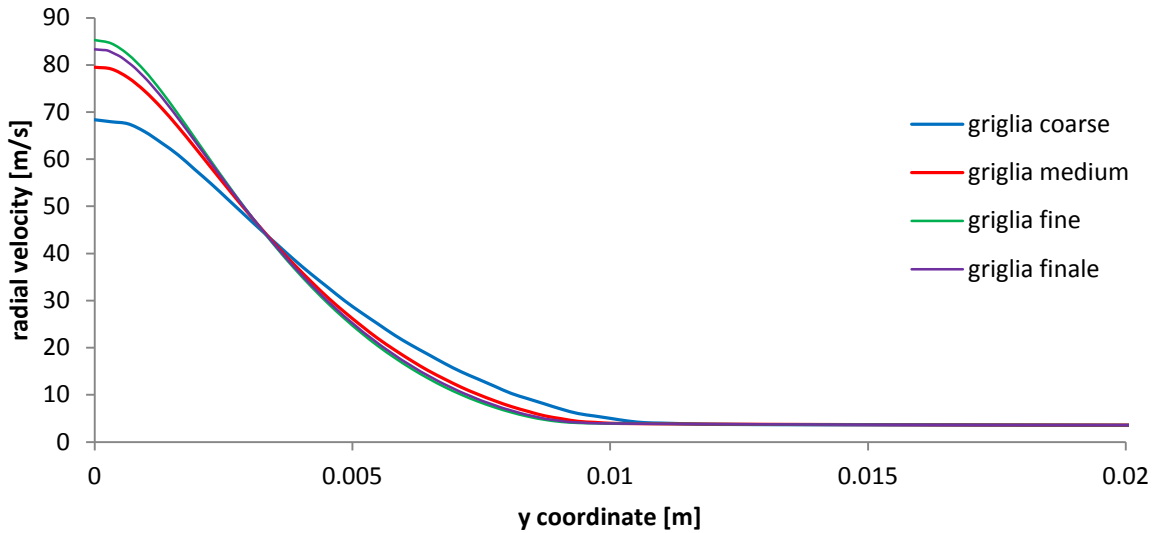


Figura 3.2.10 Profili velocità radiale delle tre griglie utilizzate

## 2.2 Modello fisico

La maggior parte dei flussi che si incontrano in applicazioni pratiche ingegneristiche sono di tipo turbolento e quindi caratterizzati da fluttuazioni delle variabili (concentrazione, velocità...). La turbolenza favorisce i fenomeni di trasferimento di materia e di calore; quindi una grande quantità di ricerca è dedicata allo sviluppo di metodi numerici in grado di catturare gli effetti derivanti dalla turbolenza.

Normalmente, per la caratterizzazione di un flusso è necessaria la conoscenza di un ristretto numero di quantità come le forze medie agenti su un corpo e la loro distribuzione, il grado di miscelamento tra due flussi che si incontrano oppure la quantità di una sostanza che ha reagito. [18]

Il metodo numerico di tipo RANS (Reynolds-averaged Navier-Stokes equations) soddisfa questa necessità in quanto incentra l'attenzione sul flusso medio e sugli effetti della turbolenza sulle proprietà medie. Le equazioni di Reynolds sono versioni filtrate rispetto al tempo delle equazioni primitive di continuità, quantità di moto e energia. Benché si possano introdurre funzioni filtro temporali generalizzate, analoghe a quelle spaziali per le LES (Large Eddy Simulation), in pratica l'unico filtro usato è la media di lungo periodo. In seguito alla filtrazione secondo Reynolds la generica quantità  $\phi$  variabile nel tempo è scomposta in una componente media  $\bar{\phi}$  e in una fluttuante  $\phi'$ :

$$\phi \equiv \bar{\phi} + \phi' \quad \text{con} \quad \bar{\phi} \equiv \frac{1}{T} \int_T \phi(t) dt \quad (2.11)$$

dove  $T$  è il tempo di integrazione che deve essere sufficientemente grande rispetto alle scale temporali turbolente e abbastanza piccolo da non provocare la perdita di informazioni riguardanti il moto medio del fluido nel tempo.

La decomposizione di Reynolds è impiegata prevalentemente nell'analisi fluidodinamica di sistemi non reagenti; invece nel caso di flussi reattivi, come nel caso oggetto di tesi,

caratterizzati da forti variazioni di densità, viene utilizzata la media secondo Favre in cui si ha ancora la decomposizione della generica variabile  $\phi$  in una componente media  $\langle\phi\rangle$  e una fluttuante  $\phi''$ , ma questa volta pesate secondo la densità  $\rho$ :

$$\phi \equiv \bar{\phi} + \phi'' \quad \text{con} \quad \bar{\phi} \equiv \frac{\langle\rho\phi\rangle}{\langle\rho\rangle}. \quad (2.12)$$

In seguito all'applicazione del filtro di Favre le equazioni di continuità, del trasporto delle specie chimiche, della quantità di moto e dell'energia appaiono come di seguito

$$\frac{\partial\langle\rho\rangle}{\partial t} + \frac{\partial\langle\rho\rangle\bar{\phi}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial\langle\rho\rangle\bar{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial\langle\rho\rangle\bar{Y}_k\bar{\phi}_i}{\partial x_i} = -\frac{\partial\langle\rho\rangle\bar{Y}_k''\phi_i''}{\partial x_i} - \frac{\partial\langle J_i^k\rangle}{\partial x_i} + \langle\dot{w}_k\rangle \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial\langle\rho\rangle\bar{\phi}_j}{\partial t} + \frac{\partial\langle\rho\rangle\bar{\phi}_j\bar{\phi}_i}{\partial x_i} = -\frac{\partial\langle\rho\rangle\bar{\phi}_j''\phi_i''}{\partial x_i} - \frac{\partial\langle p\rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial\langle\tau_{ij}\rangle}{\partial x_i} + \langle\rho g_j\rangle \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial\langle\rho\rangle\bar{h}}{\partial t} + \frac{\partial\langle\rho\rangle\bar{h}\bar{\phi}_i}{\partial x_i} = -\frac{\partial\langle\rho\rangle\bar{h}''\phi_i''}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j}(\langle J_i^h\rangle + \bar{\phi}_i\tau_{ij}) + \bar{\phi}_i\bar{F}_i + \langle\dot{Q}_{rad}\rangle \quad (2.16)$$

Le equazioni da (3.13) a (3.16) sono le cosiddette FANS e sono quindi risolubili nelle variabili medie di Favre ad eccezione però di alcuni termini che rappresentano delle nuove incognite del sistema di equazioni e necessitano quindi di ulteriori espressioni che li definiscano: le equazioni di chiusura.

Il primo termine irrisolto è il tensore degli stress di Reynolds  $\bar{\phi}_j''\phi_i''$  che è definito mediante modelli di turbolenza; anche i flussi turbolenti delle specie  $\bar{Y}_k''\phi_i''$  e di calore  $\bar{h}''\phi_i''$  risultano irrisolti e per questi è solitamente effettuata una approssimazione secondo l'ipotesi del trasporto di gradiente mentre i flussi molecolari delle specie  $\langle J_i^k\rangle$  e di calore  $\langle J_i^h\rangle$ , anch'essi irrisolti, nel caso di elevati numeri di Reynolds possono considerarsi trascurabili rispetto a quelli di trasporto turbolento.

Altro termine irrisolto importante è la velocità di reazione delle specie chimiche  $\langle\dot{w}_k\rangle$  a partire dalla cui definizione nascono i modelli di combustione e la questione dell'interazione tra cinetica chimica e turbolenza.

Infine risulta irrisolto il flusso radiativo  $\langle\dot{Q}_{rad}\rangle$  che è valutabile mediante modelli di radiazione.

Di seguito è fornita una breve trattazione dei modelli utilizzati nel presente lavoro di tesi.

### 2.2.1 Modelli di turbolenza

I modelli si dividono in due classi principali: modelli di diffusione per gradiente e modelli diretti. I primi sono basati sull'ipotesi di Boussinesq, che permette di descrivere il tensore degli sforzi di Reynolds in funzione del gradiente di velocità media del fluido:



$$-\rho \langle \overline{u_i'' u_j''} \rangle = \mu_t \left( \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (2.17)$$

dove  $k$  l'energia cinetica turbolenta. Le ipotesi del trasporto del gradiente e di Boussinesq spostano il problema di chiusura delle equazioni alla determinazione della viscosità turbolenta  $\mu_t$ . I modelli di turbolenza basati sull'ipotesi di Boussinesq più diffusi sono classificati sulla base del numero di equazioni utilizzate: a zero, uno, o due equazioni. I modelli diretti invece realizzano la chiusura delle equazioni di Navier-Stokes filtrate risolvendo equazioni di trasporto per ogni singolo componente del tensore degli sforzi di Reynolds, sono quindi modelli a sette equazioni.

Questi modelli sono alla base delle procedure standard di calcolo della turbolenza dei codici CFD attualmente in commercio.

Nelle simulazioni effettuate in questo lavoro di tesi sono stati utilizzati due modelli di turbolenza appartenenti alla classe dei modelli di diffusione per gradiente e che utilizzano due equazioni per la definizione della viscosità turbolenta: il modello  $k$ - $\varepsilon$  standard e il  $k$ - $\varepsilon$  RNG. In particolare, a partire dal primo è stata considerata una variante ottenuta dalla modifica del valore della prima costante relativa alla diffusività  $C_{\varepsilon 1}$ .

### 2.2.1.1 Modello $k$ - $\varepsilon$ standard

Proposto nel 1974 da Launder e Spalding, questo è diventato uno dei modelli più utilizzati nel calcolo fluidodinamico grazie alla sua robustezza, economia di calcolo e sufficiente accuratezza per un vasto range di flussi turbolenti.

È un modello semi-empirico e parte dall'ipotesi di flusso completamente turbolento trascurando gli effetti della viscosità molecolare.

Le due equazioni su cui si basa sono l'una per l'energia cinetica turbolenta  $k$  e l'altra per la dissipazione viscosa  $\varepsilon$ :

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \text{div}(\rho k \mathbf{U}) = \text{div} \left[ \frac{\mu_t}{\sigma_k} \text{grad}(k) \right] + 2\mu_t E_{ij} \cdot E_{ij} - \rho \varepsilon \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \text{div}(\rho \varepsilon \mathbf{U}) = \text{div} \left[ \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \text{grad}(\varepsilon) \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2\mu_t E_{ij} \cdot E_{ij} - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.19)$$

attraverso le quali la viscosità turbolenta è definita come

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.20)$$

dove  $C_\mu$  è una costante adimensionale che si aggiunge alle quattro costanti contenute nelle equazioni di trasporto di  $k$  e  $\varepsilon$ .

I valori delle costanti  $C_\mu = 0.09$ ,  $\sigma_k = 1.00$ ,  $\sigma_\varepsilon = 1.30$ ,  $C_{1\varepsilon} = 1.44$  e  $C_{2\varepsilon} = 1.92$  derivano dall'interpolazione comprensiva di valori per un vasto range di flussi turbolenti. I numeri di Prandtl  $\sigma_k$  e  $\sigma_\varepsilon$  collegano le diffusività di  $k$  e  $\varepsilon$  alla diffusività turbolenta  $\mu_t$ . Il termine di pressione dell'equazione del modello per l'energia cinetica turbolenta (3.18) non può essere misurato direttamente e il suo effetto è tenuto in considerazione mediante il termine di

gradiente. La produzione e la distruzione dell'energia cinetica turbolenta sono sempre strettamente legate. La dissipazione  $\varepsilon$  è elevata quando lo è la produzione di  $k$ . L'equazione del modello per  $\varepsilon$  (3.19) assume che i suoi termini di produzione e distruzione siano proporzionali a quelli di  $k$ . Tale assunzione assicura un rapido aumento di  $\varepsilon$  nel caso di un rapido aumento di  $k$  e un sufficientemente veloce decremento per evitare valori negativi nel caso di una diminuzione di  $k$ . Il fattore  $\varepsilon/k$  nei termini di produzione e distruzione di  $\varepsilon$  rende questi termini corretti dal punto di vista dimensionale.  $C_{1\varepsilon}$  e  $C_{2\varepsilon}$  forniscono una corretta proporzionalità tra i termini corrispondenti delle due equazioni. [19]

Le costanti empiriche del modello sono considerate assumere lo stesso valore per tutti i tipi di flusso. Tuttavia questo carattere di generalità non è stato sempre riscontrato; infatti tali valori permettono un calcolo abbastanza accurato nel caso di getti piani bidimensionali, ma compaiono grandi errori nel caso di getti assialsimmetrici in cui il modello tende a sovrastimare lo spreading rate del 40%.

Al fine di ottenere calcoli accurati per getti circolari (round jets) è necessaria una modifica del modello; in particolare cambiare il valore di  $C_{1\varepsilon}$  da 1.44 a 1.6 sembra portare una minore discrepanza tra valori misurati e calcolati. [20]

Per questo motivo nelle simulazioni effettuate è stato valutato l'effetto della variazione della costante  $C_{1\varepsilon}$ .

Nonostante il modello  $k$ - $\varepsilon$  standard sia semplice e numericamente molto stabile, presenta alcune limitazioni. La principale risiede nel fatto che le equazioni sono ricavate per alti numeri di Reynolds, rendendo il metodo poco adatto nel caso di flussi prossimi a pareti solide. Altro svantaggio è la limitata accuratezza nel caso di flussi con forte viscosità o anisotropia della turbolenza.

### 2.2.1.2 Modello $k$ - $\varepsilon$ RNG

L'equazione (3.19) è stata a lungo considerata la causa principale delle limitazioni in accuratezza del metodo  $k$ - $\varepsilon$  standard in quanto la viscosità turbolenta è determinata a partire da una singola scala della lunghezza turbolenta (turbulence length scale) e di conseguenza la diffusione turbolenta calcolata è quella relativa a una specifica scala mentre nella realtà tutte le scale contribuiscono alla diffusione turbolenta.

Il modello di turbolenza  $k$ - $\varepsilon$  RNG è stato sviluppato da Yakhot et al. (1992) a partire dalle equazioni di Navier-Stokes istantanee utilizzando la tecnica matematica dei gruppi di rinormalizzazione (Re-Normalisation Group) al fine di migliorarne il carattere predittivo.

Questa derivazione analitica risulta in un modello con valori delle costanti differenti dal primo, nonché funzioni e termini addizionali nelle equazioni del trasporto di  $k$  e  $\varepsilon$ .

La formulazione delle nuove equazioni del modello è riportata di seguito:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \text{div}(\rho k \mathbf{U}) = \text{div}[\sigma_k \mu_{eff} \text{grad}(k)] + 2\mu_t E_{ij} \cdot E_{ij} - \rho \varepsilon \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \text{div}(\rho \varepsilon \mathbf{U}) = \text{div}[\sigma_\varepsilon \mu_{eff} \text{grad}(\varepsilon)] + C_{1\varepsilon}^* \frac{\varepsilon}{k} 2\mu_t E_{ij} \cdot E_{ij} - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.22)$$

Mentre il modello k- $\varepsilon$  standard è valido principalmente per alti numeri di Reynolds, il modello k- $\varepsilon$  RNG fornisce una formula analitica differenziale per la viscosità effettiva  $\mu_{eff}$  che tiene conto degli effetti a bassi numeri di Reynolds:

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t. \quad (2.23)$$

Resta comunque da considerare che l'efficacia dell'uso di questa caratteristica è subordinata ad un trattamento efficace della zona in prossimità della parete.

Grazie alla modifica della prima costante dell'equazione di  $\varepsilon$

$$C_{1\varepsilon}^* = C_{1\varepsilon} - \frac{\eta(1-\eta/\eta_0)}{1+\beta\eta^3} \quad (2.24)$$

è stato introdotto un termine correttivo che migliora sensibilmente l'accuratezza del modello nel caso di flussi ad alta deformazione

$$\eta = (2E_{ij} \cdot E_{ij})^{1/2} \frac{k}{\varepsilon}. \quad (2.25)$$

e tiene conto dell'effetto sulla turbolenza dello swirl.

I valori delle costanti di questo modello  $C_\mu = 0.0845$ ,  $\sigma_k = \sigma_\varepsilon = 1.39$ ,  $C_{1\varepsilon} = 1.42$ ,  $C_{2\varepsilon} = 1.68$  e  $\eta_0 = 4.377$  sono derivati in maniera esplicita mentre il valore di  $\beta = 0.012$  è stato ricavato sperimentalmente.

Infine, il modello k- $\varepsilon$  RNG fornisce una formula analitica per il numero di Prandtl turbolento mentre nel modello standard doveva essere fornito un valore che era poi mantenuto costante.

Tutti questi accorgimenti hanno reso il modello k- $\varepsilon$  RNG più accurato e affidabile rispetto al k- $\varepsilon$  standard per un'ampia gamma di flussi anche se in alcuni casi si è rivelato eccessivamente sensibile nei confronti dell'intensità delle deformazioni, comportamento attribuibile al parametro  $\eta$ . [19]

## 2.2.2 Ipotesi del trasporto di gradiente

Attraverso l'ipotesi del trasporto del gradiente i flussi turbolenti di trasporto delle specie e di calore possono essere espressi in funzione del trasporto convettivo premoltiplicato per il rapporto tra la viscosità turbolenta  $\mu_t$  e il numero di Schmidt turbolento per la specie k-esima  $Sc_{kt}$  e il numero di Prandtl turbolento  $Pr_t$ :

$$\langle \rho \rangle \overline{Y_k'' \phi_i''} = - \frac{\mu_t}{Sc_{kt}} \frac{\partial \overline{Y_k}}{\partial x_i} \quad (2.26)$$

$$\langle \rho \rangle \overline{h'' \phi_i''} = - \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \overline{h}}{\partial x_i} \quad (2.27)$$

I modelli di diffusione per gradiente richiedono la definizione di  $Sc_t$  come rapporto tra la diffusività cinematica  $\nu_t = \frac{\mu_t}{\rho}$  e la diffusività di materia  $D_t$  turbolenta

$$Sc_t = \frac{\mu_t}{\rho D_t} \quad (2.28)$$

tuttavia non è stato stabilito un valore universale e sono utilizzati diversi valori empirici

Nella maggior parte dei flussi turbolenti reattivi  $Sc_t$  e  $Pr_t$  sono utilizzati per la determinazione dei trasporti turbolenti della frazione di miscela, delle specie, dell'energia o della temperatura, in base alla modellazione del trasporto della quantità di moto. Il numero di Schmidt turbolento non ha effetto significativo sul campo della velocità, mentre influenza fortemente il campo di temperatura.

Quando la diffusività cinematica turbolenta  $\nu_t$  è maggiore della diffusività di materia turbolenta  $D_t$ ,  $Sc_t$  è maggiore dell'unità. Il numero di Schmidt turbolento è simile al numero di Schmidt  $Sc$  che un numero adimensionale approssimabile al rapporto tra la diffusività molecolare della quantità di moto (viscosità cinematica) e la diffusività molecolare di massa. Si deve anche considerare che il numero di Prandtl  $Pr_t$  rappresenta il rapporto tra la diffusività della quantità di moto  $\nu$  e la diffusività termica  $\alpha$  turbolente. [21]

I valori di ottimo dello  $Sc_t$  sono distribuiti all'interno di un range tra 0.2 e 1.3 e lo specifico valore scelto ha effetto significativo sui risultati della predizione. In particolare, nella modellazione CFD del trasporto di massa turbolento è spesso utilizzato il valore 0.7 in quanto è stato confermato da Spalding (1971) che il profilo mediato sul tempo della concentrazione è più spesso di quello della velocità, di conseguenza tale valore conferisce al modello una maggiore aderenza nei confronti dei risultati sperimentali. D'altra parte valori pari a 0.9 sono stati riscontrati vicino alla parete da Launder (1978).

Yimer (2002), in seguito a esperimenti su getti liberi assialsimmetrici, ha riscontrato un andamento monotono del  $Sc_t$  dal valore di 0.62 a livello dell'asse fino a un massimo di 1.1 allontanandosi da esso. Per questo tipo di flusso un valore pari a 0.9 mostra un buon accordo con i dati sperimentali, quindi una valutazione non accurata del campo di moto può essere compensata con un valore maggiore del  $Sc_t$ . [22]

A livello di questa equazione di chiusura, è stata valutata l'influenza del numero di Schmidt turbolento  $Sc_t$  a parità di modello di turbolenza k- $\epsilon$  standard.

### 2.2.3 Meccanismi cinetici per la combustione dell'idrogeno

In molti processi di combustione, il flusso del fluido è parte integrante del processo di combustione. In condizioni di combustione non premiscelata, le correnti di combustibile e ossidante sono miscelate attraverso il flusso dei fluidi e la turbolenza e le temperature, le concentrazioni delle specie e la loro distribuzione nella combustione risultante sono particolarmente controllate dal flusso. Analogamente, nella combustione premiscelata, la geometria, il flusso e la turbolenza creati dai processi di introduzione della carica e compressione precedenti l'ignizione, giocano un ruolo importante nelle caratteristiche della combustione.

Il problema principale è il calcolo del tasso di generazione (o distruzione) volumetrica delle specie dovuto alle reazioni chimiche compare come termine di sorgente (o pozzo):

$$\dot{w}_k = W_k \sum_{i=1}^{N_i} \nu_{kj} w_j \quad (2.29)$$

con

$$w_j = k_{fj} \prod_{k=1}^{N_k} C_i^{v'_{ji}} - k_{bj} \prod_{k=1}^{N_k} C_i^{v''_{ji}} \quad (2.30)$$

$$\sum_{k=1}^{N_k} \dot{w}_k = 0 \quad (2.31)$$

dove  $k_{fj}$  è la costante cinetica *forward* della j-esima reazione e  $k_{bj}$  la costante cinetica *backward*;  $v'_{ji}$  e  $v''_{ji}$  i coefficienti stechiometrici di reagenti e prodotti; N il numero totale delle specie coinvolte e C la concentrazione molare (kmol/m<sup>3</sup>) della specie.

Le costanti cinetiche sono indipendenti dalle concentrazioni ed esprimibili mediante la legge di Arrhenius

$$k = AT^\beta \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (2.32)$$

dove A è il fattore pre-esponenziale,  $\beta$  il parametro esponenziale della temperatura assoluta T e  $E_a$  l'energia di attivazione; queste costanti sono specifiche per la particolare reazione mentre  $R=8.314$  kJ/kmolK è la costante universale dei gas.

La combustione non avviene secondo una singola reazione ma può essere necessario un grande numero di steps. I prodotti necessitano un certo tempo per raggiungere l'equilibrio. La cinetica chimica sostanzialmente determina il tempo necessario a un sistema reagente a raggiungere il proprio stato finale di equilibrio.

In questo lavoro di tesi è stata presa in considerazione la combustione dell'idrogeno e nei paragrafi successivi si procede alla descrizione degli schemi cinetici utilizzati per rappresentare il processo oggetto di analisi. Gli schemi cinetici utilizzati sono di tipo dettagliato e ridotto.

La cinetica chimica  $H_2/O_2$  per la combustione dell'idrogeno può essere descritta attraverso diversi meccanismi dettagliati, sviluppati negli ultimi decenni, che sono stati testati e validati sulla base di dati sperimentali raccolti all'interno di un range di condizioni fisiche. Alcuni di questi schemi sono stati ottimizzati per la combustione di idrogeno puro, ma la maggior parte sono sottomodelli inclusi in altri più ampi rivolti alla descrizione della combustione di idrocarburi come metano.

### 2.2.3.1 Meccanismo Li et al.

Questo meccanismo, basato su un meccanismo inizialmente sviluppato da Dryer e poi da Mueller, consiste in 19 reazioni elementari reversibili elencate nella Tabella 2.1.

Le specie chimiche considerate sono 9:  $H_2$ , H, O,  $O_2$ , OH,  $H_2O$ ,  $HO_2$ ,  $H_2O_2$ , e  $N_2$ .

L'eccellente accordo delle predizioni del modello con le osservazioni sperimentali conferma che il meccanismo è comprensivo e che quindi possiede buone capacità predittive per diversi sistemi sperimentali, incluse fiamme sperimentali ad alta pressione.

Il meccanismo di Mueller deriva dalla modifica di quello di Yetter et al. con lo scopo di accordarlo ai dati sperimentali di un range di pressioni più ampio (0.3-15.7 atm) e uno più stretto di temperature (850-1040K) rispetto al precedente. Lo schema risultante prevede 19

reazione ed è stato ampiamente studiato in condizioni di *flow reactor* ma non per altri tipi di situazioni sperimentali.

Tabella 2.1 Meccanismo Li et al. [23]

		A	$\beta$	E
<b>Reazioni di ramificazione</b>				
1	$\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{O}$	3.547e+15	-0.406	16.599
2	$\text{H}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{H}$	5.080e+04	2.670	6.29
3	$\text{H}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	0.216e+09	1.510	3.43
4	$\text{H}_2\text{O} + \text{O} \rightleftharpoons 2 \text{OH}$	2.970e+06	2.020	13.4
<b>Reazioni di dissociazione/ricombinazione</b>				
5	$\text{H}_2 + \text{M} \rightleftharpoons 2 \text{H} + \text{M}^a$	4.577e+19	-1.400	104.38
	$\text{H}_2 + \text{Ar} \rightleftharpoons 2 \text{H} + \text{Ar}$			
	$\text{H}_2 + \text{He} \rightleftharpoons 2 \text{H} + \text{He}$			
6	$2 \text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{M}^a$	6.165e+15	-0.500	0.00
	$2 \text{O} + \text{Ar} \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{Ar}$			
	$2 \text{O} + \text{He} \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{He}$			
7	$\text{H} + \text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{M}^a$	4.714e+18	-1.000	0.00
8	$\text{H} + \text{OH} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{M}^b$	3.800e+22	-2.000	0.00
<b>Formazione e consumo <math>\text{HO}_2</math></b>				
9	$\text{H} + \text{O}_2 (+\text{M}) \rightleftharpoons \text{HO}_2 (+\text{M})^c$	$k_0$ 6.366e+20	-1.720	0.52
	$\text{H} + \text{O}_2 (+\text{M}) \rightleftharpoons \text{HO}_2 (+\text{M})^d$	$k_0$ 9.04e+19	-1.50	0.49
		$k_\infty$ 1.475e+12	0.600	0.00
10	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{O}_2$	1.660e+13	0.00	0.823
11	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightleftharpoons 2 \text{OH}$	7.079e+13	0.00	0.295
12	$\text{HO}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{O}_2$	0.325e+14	0.00	0.00
13	$\text{HO}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	2.890e+13	0.00	-0.497
<b>Formazione e consumo <math>\text{H}_2\text{O}_2</math></b>				
14	$2 \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2^e$	4.200e+14	0.00	11.982
	$2 \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$	1.300e+11	0.00	-1.6293
15	$\text{H}_2\text{O}_2 (+\text{M}) \rightleftharpoons 2 \text{OH} (+\text{M})$	$k_0$ 1.20e+17	0.00	45.5
		$k_\infty$ 2.95e+14	0.00	48.4
16	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{OH}$	0.241e+14	0.00	3.97
17	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{H}_2$	0.482e+14	0.00	7.95
18	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{OH}$	9.550e+06	2.00	3.97
19	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$	1.000e+12	0.00	0.00
	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$	5.800e+14	0.00	9.557

Units are  $\text{cm}^3\text{-mol-s-kcal-K}$ , and  $k = AT^\beta \exp(-E/RT)$

<sup>a</sup> Efficiency factors are:  $\epsilon_{\text{H}_2\text{O}}=12.0$ ,  $\epsilon_{\text{H}_2}=2.5$ ,  $\epsilon_{\text{Ar}}=0.75$ , and  $\epsilon_{\text{He}}=0.75$ . When a rate constant is declared specifically for Ar or He collision partner, the efficiency of Ar or He is set to zero when determining M for the same reaction.

<sup>b</sup> Efficiency factors are  $\epsilon_{\text{H}_2\text{O}}=12.0$ ,  $\epsilon_{\text{H}_2}=2.5$ ,  $\epsilon_{\text{Ar}}=0.38$ , and  $\epsilon_{\text{He}}=0.38$ .

<sup>c</sup> When the main bath gas is  $\text{N}_2$  ( $\text{M}=\text{N}_2$ ). Troe parameter is  $F_c=0.8$ . Efficiency factors are  $\epsilon_{\text{H}_2\text{O}}=11.0$ ,  $\epsilon_{\text{H}_2}=2.0$ , and  $\epsilon_{\text{O}_2}=0.78$ .

<sup>d</sup> When the main bath gas is Ar or He ( $\text{M}=\text{Ar}$  or  $\text{He}$ ). Troe parameter is  $F_c=0.5$ . Efficiency factors are  $\epsilon_{\text{H}_2\text{O}}=16.0$ ,  $\epsilon_{\text{H}_2}=3.0$ ,  $\epsilon_{\text{O}_2}=1.1$ , and  $\epsilon_{\text{He}}=1.2$ .

<sup>e</sup> Reactions (14) and (19) are expressed as the sum of the two rate expressions.

<sup>f</sup> Troe parameter is  $F_c=0.5$ . Efficiency factors are  $\epsilon_{\text{H}_2\text{O}}=12.0$ ,  $\epsilon_{\text{H}_2}=2.5$ ,  $\epsilon_{\text{Ar}}=0.64$ , and  $\epsilon_{\text{He}}=0.64$ .

Successivamente Li et al. hanno aggiornato questo meccanismo  $H_2/O_2$  basandosi su dati termodinamici più recenti e costanti cinetiche validati su un più esteso campo di applicazioni sperimentali (0.3-87 atm e 298-3000 K).

I parametri che sono stati rivisti e modificati riguardano l'entalpia di formazione del radicale OH, la costante cinetica della reazione di ramificazione 1)  $H+O_2=O+OH$  e della 8)  $H+OH+M=H_2O+M$  e infine la costante cinetica del limite inferiore di pressione della reazione competitiva di formazione 9)  $H+O_2(+M)=HO_2(+M)$ . [24]

### 2.2.3.2 Meccanismo San Diego

Meccanismo sviluppato da Williams e co-workers alla University of California di San Diego, comprende 244 reazioni che impiegano 50 specie; ma considerando la sola combustione dell'idrogeno, si riduce alle 21 reazioni reversibili elencate nella Tabella 2.2 e 8 specie:  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$ ,  $H$ ,  $O$ ,  $OH$ ,  $HO_2$  e  $H_2O_2$ .

Questo meccanismo è stato progettato in riferimento alle condizioni più rilevanti per le fiamme: alte temperature di ignizione e detonazione. La derivazione è stata fatta partendo da sistemi chimici semplici per poi passare in modo graduale a sistemi di maggiore complessità. In questo approccio il numero delle specie e reazione è stato mantenuto al minimo necessario per la descrizione dei sistemi e dei fenomeni in considerazione, potendo in questo modo minimizzare il più possibile le incertezze dei parametri impiegati.

Quindi il principio su cui si basa il meccanismo è in disaccordo sul sottostare i valori di altri data base, molti dei quali tendono a includere tutti gli steps elementari potenzialmente rilevanti ricercando alti livelli di completezza.

Attraverso i risultati ottenuti in modo sperimentale è stato osservato che soltanto i parametri di un numero relativamente ristretto di reazioni elementari riveste un'importanza cruciale per quel che concerne le predizioni ottenibili con il modello e che gli altri steps, presenti nel caso sia considerato un numero più ampio di reazioni, producono effetti i cui contributi sono così piccoli da considerare raramente significativi.

Questa osservazione si è rivelata vantaggiosa poiché le incertezze legate ai parametri cinetici aumentano in modo proporzionale con il numero di reazioni elementari coinvolte nel meccanismo.

Il database del presente meccanismo è in continua evoluzione e risulta applicabile a un numero sempre più elevato di processi di combustione e detonazione; inoltre ha dimostrato la sua efficacia per la predizione delle velocità delle fiamme laminari, del ritardo di ignizione e della temperatura del flusso ossidante in condizioni di auto ignizione. [25]

Tabella 2.2 Meccanismo San Diego [25]

		A <sup>a</sup>	β	E <sup>a</sup>
1	H+O <sub>2</sub> ⇌OH+O	3.520e+16	-0.70	17.069
2	H <sub>2</sub> +O⇌OH+H	5.060e+04	2.67	6.290
3	H <sub>2</sub> +OH⇌H <sub>2</sub> O+H	1.170e+09	1.30	3.635
4	H <sub>2</sub> O+O⇌2 OH	7.600e+00	3.84	12.779
5	2 H+M⇌H <sub>2</sub> +M <sup>b</sup>	1.300e+18	-1.00	0.00
6	H+OH+M⇌H <sub>2</sub> O+M <sup>b</sup>	4.000e+22	-2.00	0.00
7	2 O+M⇌O <sub>2</sub> +M <sup>b</sup>	6.170e+15	-0.50	0.00
8	H+O+M⇌OH+M <sup>b</sup>	4.710e+18	-1.00	0.00
9	O+OH+M⇌HO <sub>2</sub> +M <sup>b</sup>	8.000e+15	0.00	0.00
10	H+O <sub>2</sub> +M⇌HO <sub>2</sub> +M <sup>c</sup>	k <sub>0</sub> 5.750e+19 k <sub>∞</sub> 4.650e+12	-1.40 0.44	0.00 0.00
11	HO <sub>2</sub> +H⇌2 OH	7.080e+13	0.00	0.294
12	HO <sub>2</sub> +H⇌H <sub>2</sub> +O <sub>2</sub>	1.660e+13	0.00	0.822
13	HO <sub>2</sub> +H⇌H <sub>2</sub> O+O	3.100e+13	0.00	1.720
14	HO <sub>2</sub> +O⇌OH+O <sub>2</sub>	2.000e+13	0.00	0.00
15	HO <sub>2</sub> +OH⇌H <sub>2</sub> O+O <sub>2</sub>	2.890e+13	0.00	-0.497
16	2OH+M⇌H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +M <sup>d</sup>	k <sub>0</sub> 2.300e+18 k <sub>∞</sub> 7.400e+13	-0.90 -0.37	-1.701 0.00
17	2 HO <sub>2</sub> ⇌H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +O <sub>2</sub>	3.020e+12	0.00	1.386
18	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +H⇌HO <sub>2</sub> +H <sub>2</sub>	4.790e+15	0.00	7950
19	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +H⇌H <sub>2</sub> O+OH	1.000e+13	0.00	3.585
20	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +OH⇌H <sub>2</sub> O+HO <sub>2</sub>	7.080e+12	0.00	1.434
21	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> +O⇌HO <sub>2</sub> +OH	9.630e+06	2.00	3.991

<sup>a</sup> Units are cm<sup>3</sup>-mol-s-kcal-K, and  $k=AT^b \exp(-E/RT)$

<sup>b</sup> Chaperon efficiencies are 2.5 for H<sub>2</sub>, 16.0 for H<sub>2</sub>O, and 1.0 for all other species;  
Trope falloff with Fc = 0.5

<sup>c</sup> Chaperon efficiencies are 2.5 for H<sub>2</sub>, 12.0 for H<sub>2</sub>O, and 1.0 for all other species.

<sup>d</sup> Chaperon efficiencies are 2.5 for H<sub>2</sub>, 6.0 for H<sub>2</sub>O, and 1.0 for all other species;  
 $Fc=0.265 \exp(-T/94K)+0.735 \exp(-T/1756K)+\exp(-5182K/T)$

### 2.2.3.3 Meccanismo San Diego skeletal

La riduzione del precedente meccanismo è cominciata in seguito alle osservazioni sulla struttura della fiamma e ai calcoli relativi al fenomeno di auto ignizione, quando è stato riscontrato che molte delle reazioni elementari hanno un contributo trascurabile sul processo di reazione e di conseguenza, in una prima approssimazione, possono essere scartate. In questo modo si sono ottenute le 12 reazioni elementari, di cui soltanto 6 sono reversibili, riportate in Tabella 2.3 che assicurano una descrizione affidabile e con perdite minime a livello di precisione, delle fiamme premiscelate e non premiscelate, dei fenomeni di autoaccensione, di deflagrazione, di detonazione su un ampio intervallo di temperature, da pressioni basse a pressioni molto alte.

I meccanismi del tipo skeletal, costituiti da un numero minore di reazioni, possono essere utilizzati per condizioni di combustione specifiche. Ad esempio, è stato recentemente confermato che il sottomeccanismo costituito dalle reazioni dalla 1) alla 3), dalla reazione di



ricombinazione 4f) e dalle 5f), 6f) e 7f) di consumo del radicale  $\text{HO}_2$ , descrive in modo accurato le condizioni di deflagrazione magra.

Le reazioni di ricombinazione diretta 8f) e 9f) devono essere aggiunte al precedente sottomodello nel caso sia richiesta una maggiore accuratezza nei casi di deflagrazione stechiometrica o ricca così come per fiamme non premiscelate.

La reazione 6b) è responsabile della generazione iniziale dei radicali nei primi stadi di induzione dei processi di auto ignizione.

Gli steps aggiuntivi quali 8b) e 9b) non sono importanti ai fini delle reazioni di inizio della catena, ma devono essere mantenuti nel caso in cui l'equilibrio chimico a elevate temperature, fattore chiave per un'accurata computazione dei fenomeni di detonazione, debba essere accuratamente descritto.

**Tabella 2.3** Meccanismo San Diego skeletal [26]

			<b>A<sup>a</sup></b>	<b><math>\beta</math></b>	<b>E<sup>a</sup></b>
<b>1</b>	$\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{O}$	$k_f$	$3.52\text{e}+16$	-0.70	71.42
		$k_b$	$7.04\text{e}+13$	-0.26	0.60
<b>2</b>	$\text{H}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{H}$	$k_f$	$5.06\text{e}+04$	2.67	26.32
		$k_b$	$3.03\text{e}+04$	2.63	20.23
<b>3</b>	$\text{H}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	$k_f$	$1.17\text{e}+09$	1.30	15.21
		$k_b$	$1.28\text{e}+10$	1.19	78.25
<b>4</b>	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{M}^b$	$k_0$	$5.75\text{e}+19$	-1.40	0.00
		$k_\infty$	$4.65\text{e}+12$	0.44	0.00
<b>5</b>	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightleftharpoons 2 \text{OH}$		$7.08\text{e}+13$	0.00	1.23
<b>6</b>	$\text{HO}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{O}_2$	$k_f$	$1.66\text{e}+13$	0.00	3.44
		$k_b$	$2.69\text{e}+12$	0.36	231.86
<b>7</b>	$\text{HO}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$		$2.89\text{e}+13$	0.00	-2.08
<b>8</b>	$\text{H} + \text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{M}^c$	$k_f$	$4.71\text{e}+18$	-1.00	0.00
		$k_b$	$1.03\text{e}+23$	-1.75	496.14
<b>9</b>	$2 \text{H} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{M}^c$	$k_f$	$1.30\text{e}+18$	-1.00	0.00
		$k_b$	$3.04\text{e}+17$	-0.65	433.09
<b>10</b>	$2 \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$		$3.02\text{e}+12$	0.00	5.8
<b>11</b>	$\text{HO}_2 + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}_2 + \text{H}$		$1.62\text{e}+11$	0.61	100.14
<b>12</b>	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons 2 \text{OH} + \text{M}^d$	$k_0$	$8.15\text{e}+23$	-1.9	207.62
		$k_\infty$	$2.62\text{e}+19$	-1.39	214.74

<sup>a</sup> Units are mol, s,  $\text{cm}^3$ , kJ, and K.

<sup>b</sup> Chaperon efficiencies are 2.5 for  $\text{H}_2$ , 16.0 for  $\text{H}_2\text{O}$ , and 1.0 for all other species; Troe falloff with  $F_c = 0.5$ .

<sup>c</sup> Chaperon efficiencies are 2.5 for  $\text{H}_2$ , 12.0 for  $\text{H}_2\text{O}$ , and 1.0 for all other species.

<sup>d</sup> Chaperon efficiencies are 2.5 for  $\text{H}_2$ , 6.0 for  $\text{H}_2\text{O}$ , and 1.0 for all other species;  $F_c = 0.265 \exp(-T/94 \text{ K}) + 0.735 \exp(-T/1756 \text{ K}) + \exp(-5182 \text{ K}/T)$ .

La chimica del radicale  $\text{H}_2\text{O}_2$ , d'altra parte, è importante per la descrizione della combustione in condizioni a temperature vicine oppure al di sotto della temperatura di crossover associata al secondo limite esplosività di miscele idrogeno-ossigeno, quando la velocità di produzione dei radicali attraverso i normali cammini di ramificazione/terminazione della catena controllati dalle reazioni 1f) e 4f) diventa

paragonabile o inferiore da quella fornita dalla reazione 12f), come accade ad esempio nel caso di deflagrazione vicino ai limiti di esplosività.

Le reazioni elementari 10f) e 11f) sono responsabili della generazione di  $\text{H}_2\text{O}_2$  a partire da  $\text{HO}_2$ , con l'effetto di rendere quest'ultimo soltanto nel caso di assenza di ossigeno, come avviene al limite povero di infiammabilità.

#### 2.2.3.4 Meccanismi ridotti

Con l'aumento dell'affidabilità dei codici di fluidodinamica computazionale è aumentato anche l'interesse nello studio dei meccanismi di combustione ridotti che permettono una descrizione affidabile del comportamento della fiamma, riducendo il costo computazionale necessario al calcolo grazie al minor numero di reazioni e di specie coinvolte.

La metodologia alla base della costruzione di un modello ridotto segue diverse fasi. Prima di tutto deve essere scelto un meccanismo dettagliato, a partire dal quale viene determinato un meccanismo di tipo skeletal attraverso l'eliminazione delle reazioni che hanno influenza trascurabile sul processo considerato. L'ulteriore riduzione del meccanismo skeletal appena trovato deve avvenire in seguito alla verifica e validazione dello stesso mediante il confronto con i risultati ottenuti con il primo modello dettagliato.

A questo punto è possibile procedere con la riduzione del meccanismo skeletal introducendo l'ipotesi di stato quasi stazionario (quasi-steady state assumption) per le specie intermedie molto reattive che sono quindi rimosse dal meccanismo e rimpiazzate con relazioni di tipo implicito. Questa semplificazione si applica alla descrizione delle specie intermedie quando i loro tempi di produzione e consumo sono molto minori dei tempi di accumulo e trasporto convettivo e diffusivo; in queste condizioni i termini di accumulo convettivi e diffusivi sono quindi inferiori rispetto ai termini chimici e possono essere, in prima approssimazione, trascurati. In questo modo le equazioni del radicale stazionario sono ridotte a un bilancio tra produzione e consumo chimico che sostituiscono le corrispondenti equazioni differenziali riducendo di un ordine di grandezza il sistema di equazioni da risolvere.

Naturalmente, l'accuratezza dell'approssimazione e il numero di specie intermedie per le quali sia possibile introdurre l'ipotesi di stato stazionario senza osservare perdite eccessive in termini di precisione dipendono dalle condizioni di combustione. Nel caso di deflagrazioni, l'approssimazione può essere fatta per le specie  $\text{OH}$ ,  $\text{O}$  e  $\text{HO}_2$  ma non per gli atomi  $\text{H}$  a meno di non trovarsi vicino il limite povero di infiammabilità. Per fiamme diffuse, l'ipotesi di stato stazionario per l' $\text{OH}$  è più accurata di quella per l' $\text{O}$  se l'obiettivo è il calcolo delle velocità di ignizione e estinzione in configurazioni controcorrente; ma anche imponendo lo stato stazionario per entrambe le specie intermedie, l'errore rilevato è intorno al 20% e quindi accettabile. Invece per processi di auto ignizione il radicale oggetto di ipotesi stazionaria varia a seconda della concentrazione del combustibile: nel caso di condizioni estremamente magre, il radicale da scegliere è l' $\text{H}$ , mentre in sistemi ricchi l'ipotesi è valida per l' $\text{O}$  e l' $\text{OH}$ .

In ogni caso la concentrazione della molecola  $\text{H}_2\text{O}_2$  è sufficientemente piccola da permettere l'applicazione dell'ipotesi di stazionarietà anche per questa specie nonostante non si tratti di un radicale. [26]

A partire dal meccanismo San Diego skeletal, sulla base delle considerazioni precedenti, Boivin et al. Hanno sviluppato un meccanismo ridotto composto da 4 reazioni elementari che fornisce risultati soddisfacenti in tutte le condizioni di funzionamento. Successivamente tale meccanismo, grazie all'introduzione di una singola specie X, che rappresenta l' $\text{HO}_2$  nel caso di elevate temperature di ignizione o l' $\text{H}_2\text{O}_2$  se le temperature sono basse, è stato ridotto a uno a tre reazioni. [27]

La prima ipotesi fatta riguarda l'applicazione dello stato stazionario per l'O e OH e la combinazione lineare dei ratei di produzione delle specie:

$$\begin{aligned}
 \dot{C}_{\text{H}_2} - \dot{C}_{\text{OH}} - 2\dot{C}_{\text{O}} &= -3\omega_I + \omega_{II} - \omega_{III} - \omega_{IV} \\
 \dot{C}_{\text{O}_2} &= -\omega_I - \omega_{III} - \omega_{IV} \\
 \dot{C}_{\text{H}_2\text{O}} + \dot{C}_{\text{O}} + \dot{C}_{\text{OH}} &= 2\omega_I \\
 \dot{C}_{\text{H}} + \dot{C}_{\text{OH}} + 2\dot{C}_{\text{O}} &= 2\omega_I - 2\omega_{II} + \omega_{III} \\
 \dot{C}_{\text{HO}_2} &= \omega_{III} \\
 \dot{C}_{\text{H}_2\text{O}_2} &= \omega_{IV}
 \end{aligned} \tag{2.33}$$

dove

$$\begin{aligned}
 \omega_I &= \omega_1 + \omega_{5f} + \omega_{12f} \\
 \omega_{II} &= \omega_{4f} + \omega_8 + \omega_9 - \omega_{10f} - \omega_{11f} \\
 \omega_{III} &= \omega_{4f} - \omega_{5f} - \omega_6 - \omega_{7f} - 2\omega_{10f} - \omega_{11f} \\
 \omega_{IV} &= \omega_{10f} + \omega_{11f} - \omega_{12f}
 \end{aligned} \tag{2.34}$$

Le reazioni del meccanismo a 4 steps sono quindi

**Tabella 2.4** Meccanismo ridotto 4 steps

<b>I</b>	$3 \text{ H}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons 2 \text{ H}_2\text{O} + 2 \text{ H}$
<b>II</b>	$\text{H} + \text{H} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{M}$
<b>III</b>	$\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{H}$
<b>IV</b>	$\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}_2$

Il calcolo di  $\omega_{1b}$ ,  $\omega_{7f}$  e  $\omega_{8f}$  richiede la conoscenza dei valori delle concentrazioni di O e OH, che possono essere ottenute in maniera esplicita risolvendo le equazioni di stato stazionario:

$$C_{\text{OH}} = \frac{\sqrt{A_1^2 + 4A_0A_2} - A_1}{2A_2} \tag{2.35}$$

$$C_{\text{O}} = \frac{k_{1f}C_{\text{H}}C_{\text{O}_2} + k_{2b}C_{\text{OH}}C_{\text{H}}}{k_{1b}C_{\text{OH}} + k_{2f}C_{\text{H}_2}} \tag{2.36}$$

con

$$\begin{aligned}
 A_0 &= C_{\text{H}_2}k_{2f}(2k_{1f}C_{\text{H}}C_{\text{O}_2} + k_{3b}C_{\text{H}}C_{\text{H}_2\text{O}} + 2k_{5f}C_{\text{H}}C_{\text{HO}_2} + 2k_{12f}C_{\text{H}_2\text{O}_2}C_{\text{M}_{12}} + k_{8b}C_{\text{M}_8}C_{\text{H}_2\text{O}}) \\
 A_1 &= C_{\text{H}_2}k_{2f}(k_{8f}C_{\text{H}}C_{\text{M}_8} + k_{7f}C_{\text{HO}_2} + k_{3f}C_{\text{H}_2}) - k_{1b}(k_{3b}C_{\text{H}}C_{\text{H}_2\text{O}} + k_{5f}C_{\text{H}}C_{\text{HO}_2} + \\
 &\quad 2k_{12f}C_{\text{H}_2\text{O}_2}C_{\text{M}_{12}} + k_{8b}C_{\text{M}_8}C_{\text{H}_2\text{O}}) \\
 A_2 &= k_{1b}(2k_{2b}C_{\text{H}} + k_{3f}C_{\text{H}_2} + k_{7f}C_{\text{HO}_2} + k_{8f}C_{\text{M}_8}C_{\text{H}})
 \end{aligned} \tag{2.37}$$

Questo meccanismo presenta un buon accordo rispetto ai risultati che si ottengono mediante l'utilizzo del meccanismo dettagliato.

In condizioni di ignizione lontane dal secondo limite di esplosività, trova applicazione una versione semplificata del meccanismo a 4 steps appena trovato in cui l'ipotesi di stato stazionario è stata applicata ai radicali O, OH e alla specie  $H_2O_2$  nel caso di ignizione al di sopra della temperatura di cross over; mentre al di sotto del secondo limite di esplosività l'ipotesi deve essere fatta per la specie  $HO_2$ .

In particolare, in questo lavoro di tesi è stato analizzato il modello valido al di sotto della temperatura di crossover in Tabella 2.6.

**Tabella 2.5** Meccanismo 3steps per ignizione al di sopra della  $T_{crossover}$

<b>I</b>	$3 H_2 + O_2 \rightleftharpoons 2 H_2O + 2 H$
<b>II</b>	$H + H + M \rightleftharpoons H_2 + M$
<b>III</b>	$H_2 + O_2 \rightleftharpoons HO_2 + H$

**Tabella 2.6** Meccanismo 3steps per ignizione al di sotto della  $T_{crossover}$

<b>I</b>	$3 H_2 + O_2 \rightleftharpoons 2 H_2O + 2 H$
<b>II</b>	$H + H + M \rightleftharpoons H_2 + M$
<b>III</b>	$H_2 + O_2 \rightleftharpoons H_2O_2$

Per il secondo meccanismo a 3 steps, i coefficienti sono quelli calcolati secondo la (3.34) e le concentrazioni allo stato stazionario sono calcolate dalle (3.35) e (3.36), mentre quella dell' $HO_2$  è valutata come:

$$C_{HO_2} = \sqrt{B_2^2 + B_1} - B_2 \quad (2.38)$$

con

$$B_1 = \frac{k_{6b}C_{H_2}C_{O_2} + k_{4f}C_H C_{O_2} C_{M_4}}{2k_{10f}} \quad (2.39)$$

$$B_2 = \frac{k_{5f}C_H + k_{6f}C_H + k_{7f}C_{OH} + k_{11f}C_{H_2}}{4k_{10f}} \quad (2.40)$$

I meccanismi presentati sono stati implementati in FLUENT attraverso files chemkin o mediante user's defining functions UDF.

## 2.2.4 Modelli di interazione turbolenza-cinetica chimica

Come è stato visto fino a questo punto, i processi di combustione sono governati dalle equazioni di base di trasporto e di trasferimento di calore con modelli addizionali per la chimica, il trasferimento di calore radiativo e per altri sottoprocessi. In questo paragrafo si passa alla descrizione delle tecniche di modellazione CFD usate per la descrizione della combustione.

Dai paragrafi precedenti si evince come la cinetica chimica sia determinante ai fini del raggiungimento dell'equilibrio. La combustione non è quindi indipendente rispetto ai

processi fisici e il problema principale è calcolare il termine di sorgente  $\langle \dot{w}_k \rangle$  dell'equazione del trasporto delle specie (3.14).

Un approccio diretto per la descrizione della combustione turbolenta è basato sull'espansione in serie dalla quale seguiranno le difficoltà prodotte dalla non linearità del termine di sorgente chimica. Considerando una semplice reazione irreversibile tra combustibile  $F$  e ossidante  $O$ :



dove il termine di sorgente del combustibile è espresso utilizzando la legge di Arrhenius:

$$\dot{\omega}_F = -A\rho^2 T^b Y_F Y_O \exp\left(-\frac{T_A}{T}\right) \quad (2.42)$$

in cui  $A$  è la costante pre-esponenziale e  $T_A$  la temperatura di attivazione.

Poiché il tasso di reazione è altamente non lineare, applicando il filtro temporale pesato sulla densità delle FANS,  $\overline{\dot{\omega}_F}$  non può essere espresso in funzione delle frazioni massiche mediate  $\tilde{Y}_F$  e  $\tilde{Y}_O$ , della densità media  $\bar{\rho}$  e della temperatura media  $\tilde{T}$ .

Per questo motivo si ricorre a un'espansione in serie di Taylor del termine esponenziale e di  $T^b$ :

$$\exp\left(-\frac{T_A}{\tilde{T}}\right) = \exp\left(-\frac{T_A}{\tilde{T}}\right) \left(1 + \sum_{n=1}^{+\infty} P_n \frac{T^{''n}}{\tilde{T}^n}\right) \quad (2.43)$$

$$T^b = \tilde{T}^b \left(1 + \sum_{n=1}^{+\infty} Q_n \frac{T^{''n}}{\tilde{T}^n}\right) \quad (2.44)$$

dove  $P_n$  e  $Q_n$  sono date da:

$$P_n = \sum_{i=1}^n (-1)^{n-k} \frac{(n-1)!}{(n-k)![(k-1)!]^2 k} \left(\frac{T_A}{\tilde{T}}\right)^k \quad (2.45)$$

$$Q_n = \frac{b(b+1)\cdots(b+n-1)}{n!} \quad (2.46)$$

quindi il tasso medio di reazione diventa

$$\begin{aligned} \widetilde{\dot{\omega}_F} = & -A\bar{\rho}^2 \tilde{T}^b \tilde{Y}_F \tilde{Y}_O \exp\left(-\frac{T_A}{\tilde{T}}\right) \times \left[ 1 + \frac{\widetilde{Y_F'' T''}}{\tilde{Y}_F \tilde{Y}_O} + (P_1 + Q_1) \left( \frac{\widetilde{Y_F'' T''}}{\tilde{Y}_F \tilde{T}} + \frac{\widetilde{Y_O'' T''}}{\tilde{Y}_O \tilde{T}} \right) + \right. \\ & \left. (P_2 + Q_2 + P_1 Q_1) \left( \frac{\widetilde{Y_F'' T''^2}}{\tilde{Y}_F \tilde{T}} + \frac{\widetilde{Y_O'' T''^2}}{\tilde{Y}_O \tilde{T}} \right) + \cdots \right] \end{aligned} \quad (2.47)$$

L'espressione (3.47) introduce nuove difficoltà; prima di tutto, le nuove quantità espresse come  $\widetilde{Y_k'' T''^n}$  devono essere chiuse mediante espressioni algebriche oppure equazioni di trasporto. A causa della non linearità, quando sono considerati pochi termini dell'espansione in serie, sono presenti grandi errori. Inoltre l'espressione (3.47) è abbastanza complicata e valida per reazioni irreversibili semplici e non può cioè essere estesa a schemi chimici realistici. Per i precedenti motivi, le equazioni di chiusura del termine di sorgente non sono basate sull'equazione (3.47) ma sono derivati dall'analisi fisica.

La combustione turbolenta coinvolge diverse scale di lunghezza, velocità e tempo per la descrizione del campo di moto turbolento e delle reazioni chimiche; l'analisi fisica è basata principalmente sulla comparazione di queste scale e porta a diagrammi di combustione in cui i vari regimi sono presentati in funzione di numeri adimensionali (Figura 2.11).

Il flusso turbolento è caratterizzato dal numero di Reynolds che indica in rapporto tra il trasporto turbolento e le forze di natura viscosa:

$$Re = \frac{u' l_t}{\nu} \quad (2.48)$$

con  $u'$  la velocità RMS legata alla radice quadrata dell'energia cinetica turbolenta,  $l_t$  la scala di lunghezza turbolenta e  $\nu$  la viscosità cinematica del flusso.

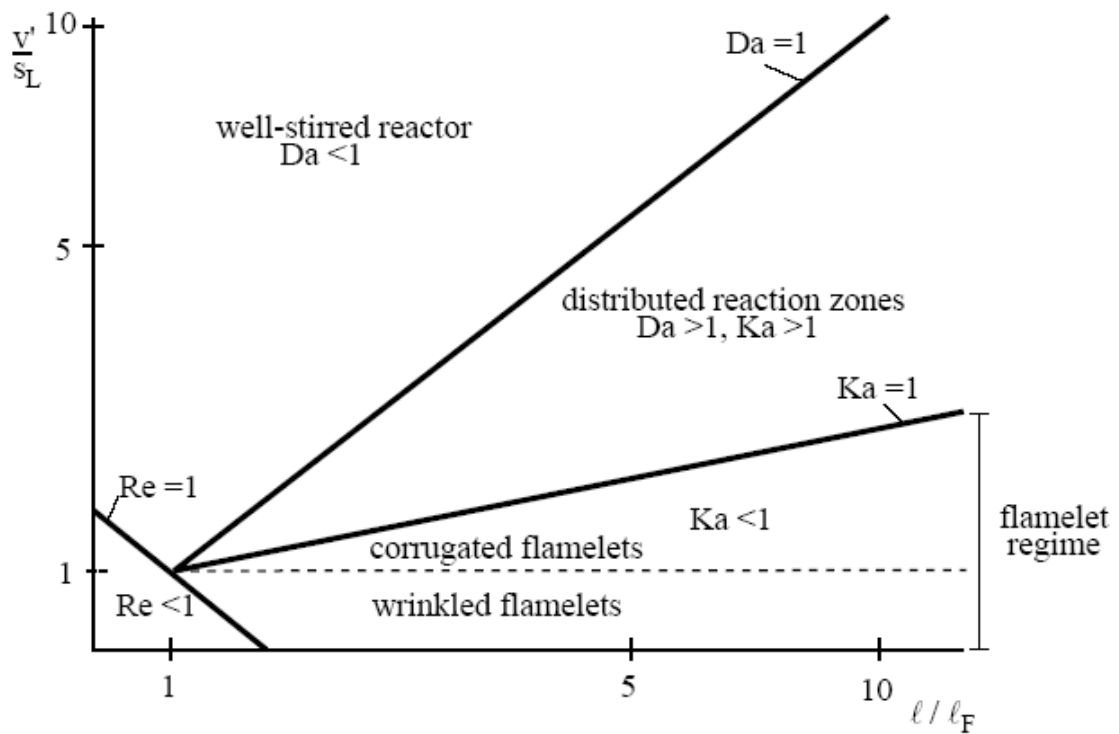


Figura 2.11 Diagramma di Borghi

Il numero di Damköhler, invece, confronta le scale temporali e della chimica:

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{l_t/u'}{\delta_r/S_L} \quad (2.49)$$

in cui  $\delta_r$  è lo spessore e  $S_L$  la velocità di propagazione della fiamma laminare. Per elevati numeri di Damköhler ( $Da \gg 1$ ), il tempo di mescolamento caratteristico  $\tau_c$  è piccolo in confronto al tempo caratteristico del flusso  $\tau_t$ , quindi la zona di reazione sarà sottile e la turbolenza non sarà in grado di modificare la struttura interna della fiamma ma si limiterà ad incresparla; la struttura può quindi essere descritta come un elemento di fiamma laminare: *flamelet*. Il regime *flamelet* si instaura quando le più piccole scale di turbolenza, come quelle di Kolmogorov  $\eta_k$ , possiedono un tempo turbolento  $\tau_k$  maggiore di  $\tau_c$ . questa transizione è descritta attraverso il numero di Karlovitz:

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_k} = \frac{\delta_r/S_L}{\eta_k/u'(\eta_k)} \quad (2.50)$$

Attraverso il numero di Karlovitz, il regime di combustione con  $Da \gg 1$  può essere ulteriormente suddiviso nel regime *flamelet* ( $Ka < 1$ ) in cui lo spessore di fiamma è più piccolo della più piccola scala di turbolenza  $\eta_k$ , questo regime è suddiviso ulteriormente in due zone a seconda che il flusso turbolento sia in grado di interagire con il fronte di fiamma determinando la formazione al suo interno di pacchetti di gas combusti e incombusti (*corrugated flamelets*) o che la velocità del flusso sia troppo bassa e che quindi provochi soltanto l'increspatura del fronte di fiamma (*wrinkled flamelets*). Per  $1 < Ka \leq 100$  i microvortici determinano un inspessimento della zona di preriscaldamento ma non alterano la zona di reazione (*distributed reaction zone*) e infine per  $Ka > 100$  le zone di preriscaldamento e reazione sono molto influenzate dal moto turbolento e non è possibile identificare una struttura di fiamma laminare (*thickened flame regime*). Questi ultimi tre regimi descritti sono raffigurati in Figura 2.12.

D'altra parte, un basso numero di Damköhler ( $Da \ll 1$ ) indica una chimica lenta e i reagenti e prodotti sono mescolati dai moti turbolenti prima di reagire; in questa ipotesi di reattire perfettamente miscelato il tasso di reazione medio può essere espresso secondo Arrhenius (3.47). Nelle fiamme turbolente, molte delle situazioni di interesse pratico corrispondono a numeri di Damköhler medio alti. [28]

I modelli di combustione utilizzati sono:

Eddy Dissipation model, Eddy Dissipation/Finite Rate, Eddy Dissipation Concept e presumed PDF flamelet model

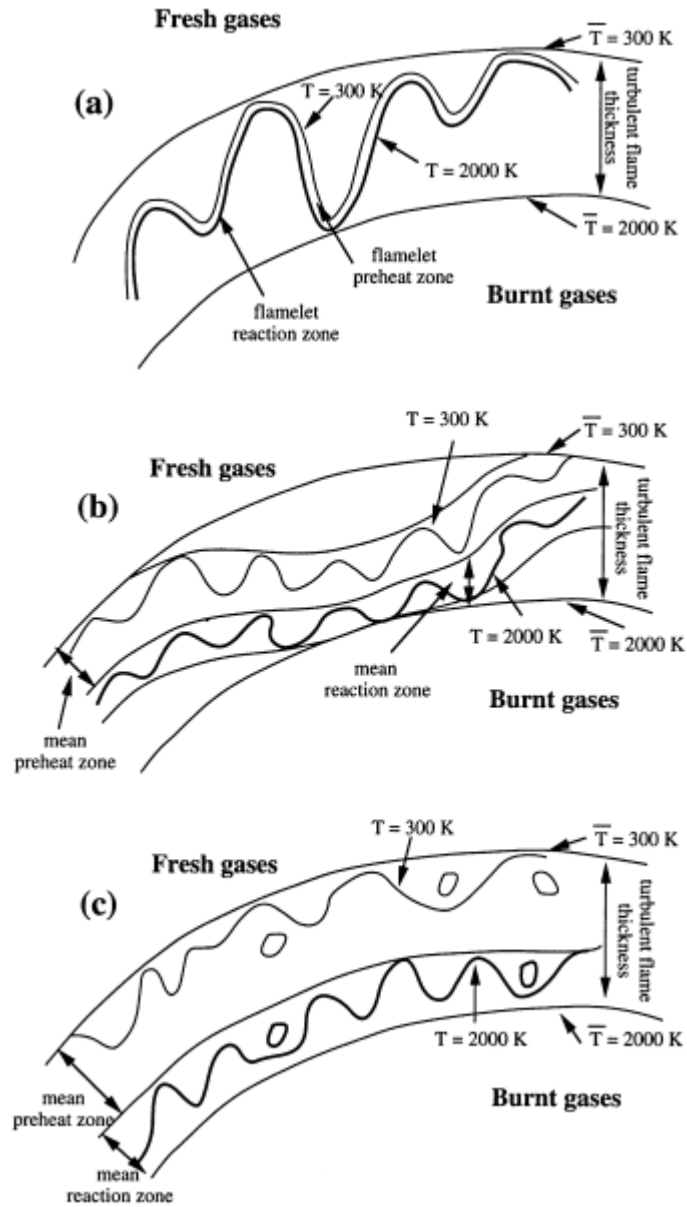
#### 2.2.4.1 Eddy dissipation model (EDM)

Concetto inizialmente introdotto da Spalding (1971) e successivamente elaborato da Magnussen and Hjertager (1976), assume i tassi di reazioni quali grandezze controllate dalla turbolenza ( $Da \gg 1$ ); in questo modo i calcoli cinetici secondo Arrhenius visti in precedenza possono essere evitati e il modello non presenta un elevato costo computazionale.

Le scale temporali utilizzate sono del tipo

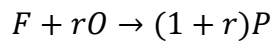
$$\tau = \frac{k}{\varepsilon} \quad (2.51)$$

con  $k$  l'energia cinetica e  $\varepsilon$  la velocità di dissipazione turbolente.



**Figura 2.12** Regimi di combustione turbolenta premiscelata a) *flamelet (thin wrinkled flames)*; b) *distributed reaction zone*; c) *thickened flame regime*. [28]

Per la generica reazione irreversibile



la velocità di reazione considerata dal modello è la minore tra

- velocità di consumo combustibile  $\widetilde{R}_F = \overline{\rho \dot{\omega}_F} = A \bar{\rho} \frac{1}{\tau_t} \tilde{Y}_F$
  - velocità di consumo ossidante  $\widetilde{R}_O = \overline{\rho \dot{\omega}_O} = A \bar{\rho} \frac{1}{\tau_t} \frac{\tilde{Y}_O}{r}$
  - velocità di formazione dei prodotti  $\widetilde{R}_P = \overline{\rho \dot{\omega}_P} = AB \bar{\rho} \frac{1}{\tau_t} \frac{\tilde{Y}_P}{1+r}$
- (2.52)



Nelle equazioni (3.52) le velocità delle reazioni chimiche sono governate dal miscelamento alle grandi scale e la combustione procede ogni volta che è presente la turbolenza e non è richiesta una sorgente di ignizione per iniziare la combustione.

Nelle fiamme non premiscelate, la turbolenza mescola lentamente il combustibile e l'ossidante nella zona di reazione dove bruciano velocemente.

La maggior parte dei combustibili brucia velocemente e la velocità globale delle reazioni è controllata dal miscelamento turbolento; perciò il modello si è rivelato una buona assunzione per la descrizione di un gran numero di combustori.

#### 2.2.4.2 Eddy dissipation/finite rate (ED/FR)

Il modello EDM è solitamente valido nei casi di fiamme non premiscelate, ma per quelle premiscelate, in cui i reagenti bruciano non appena si trovano a valle dello stabilizzatore della fiamma, perde di validità. Per rimediare a questo, le velocità di reazione sono calcolate secondo il modello precedente ma congiuntamente alla formulazione di Arrhenius (3.32):

$$\tilde{R}_R = \bar{\rho} k \prod_{j=1}^{NR} [\tilde{C}_{j,r}]^{n_{j,r}} \quad (2.53)$$

ed è considerata la velocità di reazione minore:  $\min(\tilde{R}_F, \tilde{R}_O, \tilde{R}_P, \tilde{R}_R)$ .

La velocità secondo Arrhenius agisce da interruttore cinetico impedendo l'innescarsi delle reazioni a monte della stabilizzazione della fiamma. Una volta che la fiamma si è accesa, le velocità (3.52) sono minori della (3.53) e le reazioni sono limitate dal miscelamento.

L'utilizzo di questi due modelli per meccanismi multi-step produce soluzioni incorrette poiché tali meccanismi sono basati sulle velocità di Arrhenius che differiscono a seconda della reazione, mentre nel modello EDM ogni reazione ha la medesima velocità turbolenta e quindi dovrebbe essere utilizzato per reazioni con al massimo un paio di steps.

Alla luce di quanto detto, nel presente lavoro di tesi, i modelli EDC e ED/FR sono stati scelti per la simulazione utilizzando il meccanismo globale della combustione.

#### 2.2.4.3 Eddy-Dissipation-Concept (EDC)

Mentre nei due modelli precedenti la chimica considerata è infinitamente veloce, nel modello EDC la chimica è del tipo *finite-rate*.

La considerazione di base è che i processi che avvengono alle piccole scale e che sono decisivi per il miscelamento molecolare così come per la dissipazione dell'energia cinetica turbolenta in calore, sono molto intermittenti e quindi concentrati in regioni isolate che costituiscono una piccola frazione dell'intero volume di fluido: le strutture fini.

All'interno di queste strutture, i reagenti sono considerati miscelati in modo omogeneo a livello molecolare.

In un flusso turbolento, l'energia nel flusso medio è trasferita dai vortici più grandi alle strutture fini dove l'energia meccanica è dissipata in calore; in particolare, la maggior parte della produzione di energia cinetica turbolenta si origina a livello delle interazioni tra i vortici grandi e il flusso medio, mentre la dissipazione dell'energia cinetica in calore avviene principalmente nei piccoli vortici.

Il primo livello delle strutture rappresenta l'intero spettro di turbolenza che è caratterizzato dalla velocità turbolenta  $u'$ , dalla scala di lunghezza  $L'$  e dalla frequenza o vorticità

$$\omega' = \frac{u'}{L'} \quad (2.54)$$

la velocità di dissipazione a questo livello può essere espressa come

$$\varepsilon = \zeta^2 \left( 12 \frac{u'}{L'} u'^2 + 15 \nu \left( \frac{u'}{L'} \right)^2 \right) \quad (2.55)$$

Le strutture successive sono caratterizzate da frequenza

$$\omega^n = \frac{u^n}{L^n} = \omega^{n-1} \quad (2.56)$$

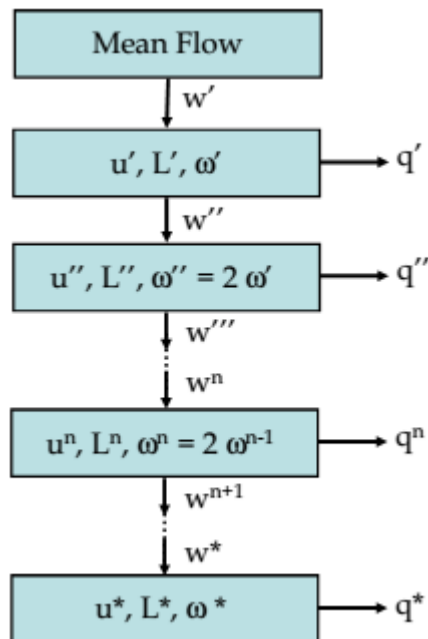
come si vede dalla Figura 2.13 di seguito.

Questa sequenza di livelli di strutture turbolente può essere protratta fino al livello delle strutture fini in cui tutta l'energia cinetica turbolenta è dissipata in calore; tali strutture sono caratterizzate da un'energia turbolenta trasferita  $w^*$

$$w^* = \zeta^2 6 \frac{u^*}{L^*} u^{*2} \quad (2.57)$$

e una dissipazione

$$q^* = \zeta^2 15 \nu \left( \frac{u^*}{L^*} \right)^2 \quad (2.58)$$



**Figura 2.13** Modello del trasferimento dell'energia meccanica dalle strutture turbolente grandi a quelle più piccole

Secondo questo modello, la dissipazione di energia avviene per i  $\frac{3}{4}$  a livello delle strutture fini; in base a tale affermazione e introducendo  $\zeta = 0.18$

$$\begin{aligned}\varepsilon &= 0.67\nu \left(\frac{u^*}{L^*}\right)^2 \\ u^* &= 1.75(\varepsilon\nu)^{1/4} \\ L^* &= 1.43 \frac{\nu^{3/4}}{\varepsilon^{1/4}}\end{aligned}\tag{2.59}$$

La velocità di mescolamento molecolare è determinata dalla velocità di mescolamento tra le strutture fini e il fluido circostante. La velocità media di trasferimento di massa tra una certa frazione di struttura fine

$$\chi = \frac{\tilde{c}_{pr}/(1+r_{fu})}{\tilde{c}_{min} + \tilde{c}_{pr}/(1+r_{fu})}\tag{2.60}$$

(in cui  $\tilde{c}_{pr}$  è la concentrazione media locale dei prodotti di reazione,  $\tilde{c}_{min}$  il minimo tra concentrazione locale di combustibile e  $\frac{\tilde{c}_{O_2}}{r_{fu}}$ , e  $r_{fu}$  è l'ossigeno stechiometrico necessario) e il resto del fluido per la specie  $i$ -esima può essere espressa come segue:

$$\bar{R}_i = \bar{\rho}\dot{m}\chi \left(\frac{c_i^0}{\rho^0} - \frac{c_i^*}{\rho^*}\right)\tag{2.61}$$

dove con  $*$  si fa riferimento alla struttura fine e con  $^0$  al fluido circostante.

Infine, la velocità di combustione tra combustibile e ossidante considerando una reazione infinitamente veloce è

$$\tilde{R}_{fu} = \frac{\bar{\rho}\dot{m}\chi}{1-\gamma^*\chi} \tilde{c}_{min}\tag{2.62}$$

Le strutture fini in cui avvengono le reazioni si troveranno a una temperatura superiore rispetto a quella locale di

$$\Delta T = \frac{\Delta H_R \tilde{c}_{min}}{\bar{\rho}c_p}\tag{2.63}$$

per cui le temperature della struttura fine e dell'ambiente circostante saranno rispettivamente:

$$T^* = \bar{T} + \Delta T\tag{2.64}$$

$$T^0 = \bar{T} - \Delta T \frac{\gamma^*\chi}{1-\gamma^*\chi}\tag{2.65}$$

Il modello EDC è in grado di gestire cinetiche chimiche complesse e permette l'implementazione di meccanismi cinetici ridotti; infatti in questo caso studio, è stato

utilizzato per la simulazione dei meccanismi dettagliati e ridotti descritti nei precedenti paragrafi 2.2.3.1 - 2.2.3.4. [29]

#### 2.2.4.4 Modello Presumed PFD transport

Secondo questo approccio, invece di derivare equazioni mediate secondo Favre, sono risolte le equazioni di trasporto per la funzione di densità della probabilità (*probabilità density functions* - *pdf*). In tal modo è seguito un numero rappresentativo di “particelle” stocastiche fluide che descrivono la pdf.

Un parametro importante è la modellazione del miscelamento delle particelle che permette la descrizione dell’evoluzione all’interno del dominio della composizione.

Quindi l’effetto della diffusione molecolare sulla composizione è rappresentata attraverso i modelli di miscelamento, di seguito sono elencati e descritti i più comuni nonché quelli utilizzati nelle simulazione condotte.

Ogni modello considera la diminuzione della varianza della composizione alla velocità  $C_\phi \frac{\varepsilon}{k}$  senza che questa influenzi la composizione media. I metodi pdf sono generalmente implementati con metodi di particelle e mesh in cui le proprietà delle particelle sono sviluppate nel tempo secondo step. Per ciascuna cella del dominio computazionale è presente un insieme di  $N$  particelle e lo step consiste nell’applicazione del modello di miscelamento all’avanzamento temporale  $\Delta t$ .

#### Modified Curl (MCurl)

Introdotta da Curl (1963) e successivamente elaborata da Janicka, Kolbe e Kollmann (1977) considera salti di composizione.

Nel caso di particelle con lo stesso peso e con una velocità proporzionale a  $C_\phi \frac{\varepsilon}{k}$ , è selezionato un paio di particelle  $p$  e  $q$  in maniera random e la loro composizione è cambiata secondo

$$\phi^{(p,new)} = \phi^{(p)} + \frac{1}{2}a(\phi^{(q)} - \phi^{(p)}) \quad (2.66)$$

$$\phi^{(q,new)} = \phi^{(q)} + \frac{1}{2}a(\phi^{(p)} - \phi^{(q)}) \quad (2.67)$$

in cui  $a$  è un numero casuale uniformemente distribuito tra 0 e 1.

Per questo caso, il numero di paia  $N_{pair}$  ricavabili da  $N$  particelle è calcolato come

$$N_{pair} = \frac{1.5 C_\phi N \Delta t}{\tau_t} \quad (2.68)$$

Mentre nel caso di particelle aventi pesi diversi, è stata sviluppata un’implementazione da parte di Nooren (1997) che conserva il valor medio e provoca il corretto decadimento della varianza. [30]

Alla costante di miscelamento  $C_\phi$  solitamente è assegnato un valore pari a 2, ma sono stati utilizzati anche altri valori, in particolare nel presente studio è stato valutato l'effetto della variazione di tale parametro.

### Euclidean Minimum Spanning Tree (EMST)

Subramaniam e Pope (1998) hanno considerato un complesso modello di interazione tra le particelle per sopperire le mancanze dei modelli più semplici. Infatti l'MCurl non tiene conto del fatto che fisicamente il miscelamento avviene tra particelle di fluido adiacenti e questo può portare a errore.

Oltre alla composizione della particella  $\phi^{(n)}(t)$ , il modello ne considera il peso  $w^{(n)}(t)$  e introduce una variabile di stato  $s^{(n)}(t)$ .

Il modello mescola paia di particelle vicine tra loro sia come composizione che spazialmente; l'accoppiamento è determinato dalla lunghezza minima del set di edges che collegano una particella all'altra.

Il risultato è una migliore accuratezza a scapito di un maggior costo computazionale.

Infine, rimane da tenere in considerazione che i sottomodelli di miscelamento dei metodi pdf sono un campo che richiede tutt'ora dei miglioramenti.

## 2.3 Condizioni al contorno

### Fuel

Rappresenta l'ugello attraverso il quale il getto di combustibile entra nella camera.

La condizione al contorno imposta è del tipo *velocity inlet* alla quale sono stati forniti i seguenti parametri

Tabella 2.7 Parametri getto combustibile

Momentum	
Velocity specification method	Magnitude, normal to boundary
Reference frame	Absolute
Velocity magnitude [m/s]	107 (constant)
Supersonic/initial gauge pressure	0
Turbulence	
Specification method	Intensity e hydraulic diameter
Turbulent intensity [%]	4.5447
Hydraulic diameter [m]	0.00457
Thermal	
Temperature [K]	305 (constant)
Mole fractions	
H <sub>2</sub>	0.2537
O <sub>2</sub>	0.0021
H <sub>2</sub> O	0.0015

## Coflow

Anche la condizione che rappresenta la corrente di gas caldi è stata scelta del tipo *velocity inlet*.

Tabella 2.8 Parametri coflow

<b>Momentum</b>	
Velocity specification method	Magnitude, normal to boundary
Reference frame	Absolute
Velocity magnitude [m/s]	3.5 (constant)
Supersonic/initial gauge pressure	0
<b>Turbulence</b>	
Specification method	Intensity e hydraulic diameter
Turbulent intensity [%]	4.682
Hydraulic diameter [m]	0.203
<b>Thermal</b>	
Temperature [K]	1045 (constant)
<b>Mole fractions</b>	
H <sub>2</sub>	0.0005
O <sub>2</sub>	0.1474
H <sub>2</sub> O	0.0989

## Outlet

Per l'uscita è stata scelta la condizione *pressure outlet* unita ai seguenti parametri.

Tabella 2.9 Parametri outlet

<b>Momentum</b>	
Gauge pressure [Pa]	0
Backflow direction specification method	Normal to boundary
<b>Turbulence</b>	
Specification method	Intensity e hydraulic diameter
Turbulent intensity [%]	5
Hydraulic diameter [m]	0.21
<b>Thermal</b>	
Temperature [K]	700 (constant)
<b>Mole fractions</b>	
H <sub>2</sub>	8.2689e-9
O <sub>2</sub>	0.1438
H <sub>2</sub> O	0.1052

## Pareti

Alle pareti (pipe est, pipe int, wall e side) è stata assegnata la tipologia *wall*, in particolare sono state considerate adiabatiche imponendo il flusso termico nullo.

## Asse

Dal momento che il dominio è di tipo assialsimmetrico, per l'asse è stata indicata la tipologia *axis* di condizione al contorno.

## 2.4 Parametri solutore

Il tipo di risolutore scelto è *pressure-based* con formulazione della velocità assoluta e operante sotto l'ipotesi di flusso stazionario.

Per quel che riguarda l'accoppiamento tra pressione e velocità è stato scelto l'algoritmo *SIMPLE*. Come già detto in precedenza, il modello spaziale è bidimensionale e di tipo assialsimmetrico; la discretizzazione spaziale è stata effettuata con il metodo iterativo del gradiente *least squares cell based* e con metodo *upwind* arrestato al secondo ordine.

Per assicurare una buona convergenza alle simulazioni, i valori dei residui sono stati imposti a  $10e-09$  e nel caso in cui, raggiunto questo limite, continuassero ad avere andamento decrescente, si è continuato ad abbassare il valore fino alla stabilizzazione.

Tabella 2.10 Parametri risolutore

<b>Solver type</b>	Pressure based
<b>Time</b>	Steady
<b>Pressure-velocity coupling</b>	SIMPLE
<b>Gradient</b>	Least square cell based
<b>Spatial discretization</b>	Second order upwind
<b>Convergence criteria</b>	absolute
<b>Residual value</b>	1e-09

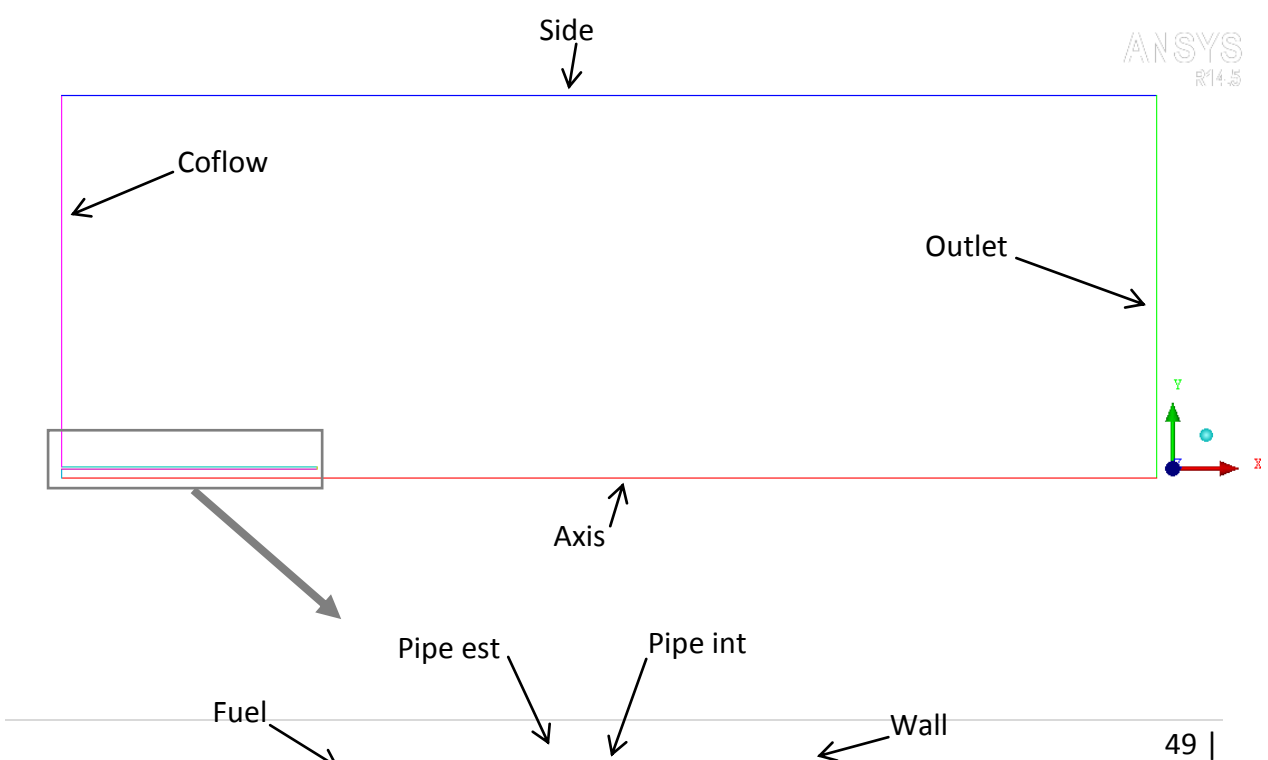




Figura 2.14 Definizione delle condizioni al contorno

## 2.5 Simulazioni

Come modello di turbolenza di partenza è stato scelto il  $k-\varepsilon$  standard e il numero di Schmidt di default pari a 0.7. Le simulazioni che sono state effettuate possono essere suddivise in due categorie sulla base degli approcci utilizzati per la modellazione dell'interazione tra cinetica chimica e turbolenta.

Partendo dal meccanismo globale di combustione, è stato fatto variare il modello di interazione tra eddy dissipation model EDM, *eddy dissipation/finite rate ED/FR* e *eddy dissipation concept EDC*. A questo punto sono stati confrontati i vari meccanismi cinetici elencati al paragrafo 2.2.3.

Il medesimo ragionamento è stato fatto con il modello di turbolenza  $k-\varepsilon$  standard modificato a livello della costante  $C_{\varepsilon 1}$  che dal valore di default pari a 1.44 è stata portata a 1.6, valore agatti per i getti; e poi a livello del numero di Schmidt turbolento che è stato portato a 0.9.

In questo modo è stato possibile rilevare l'effetto di  $C_{\varepsilon 1}$  e di  $Sc_t$ .

Successivamente è stato scelto un meccanismo cinetico, il San Diego, ed è stato variato il modello di turbolenza da  $k-\varepsilon$  standard a  $k-\varepsilon$  RNG ed è stata inoltre valutata l'accensione dell'opzione *multicomponent diffusion* per il trattamento della diffusione delle specie chimiche in modo più attento rispetto alle equazioni di trasporto.

Per quanto riguarda invece l'approccio *PDF*, è stato mantenuto costante il meccanismo cinetico San Diego e sono stati variati i modelli di miscelamento e la relativa costante.

Tabella 2.11 Elenco simulazioni EDM, ED/FR e EDC

Modello turbolenza	$Sc_t$	Modello interazione	Meccanismo cinetico	MDiff	Tcoflow
$k-\varepsilon$ standard	0.7	EDM	globale	OFF	1045 K
$k-\varepsilon$ standard	0.7	ED/FR	globale	OFF	1045 K
$k-\varepsilon$ standard	0.7	EDC	globale	OFF	1045 K
$k-\varepsilon$ standard	0.7	EDC	Li et al	OFF	1045 K
$k-\varepsilon$ standard	0.7	EDC	San Diego	OFF	1045 K
$k-\varepsilon$ standard	0.7	EDC	San Diego skeletal	OFF	1045 K
$k-\varepsilon$ standard	0.7	EDC	Boivin 4step	OFF	1045 K
$k-\varepsilon$ standard	0.7	EDC	Boivin 3step	OFF	1045 K
$k-\varepsilon$ $C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.7	EDM	globale	OFF	1045 K
$k-\varepsilon$ $C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.7	ED/FR	globale	OFF	1045 K
$k-\varepsilon$ $C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.7	EDC	globale	OFF	1045 K
$k-\varepsilon$ $C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.7	EDC	Li et al	OFF	1045 K
$k-\varepsilon$ $C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.7	EDC	San Diego	OFF	1045 K
$k-\varepsilon$ $C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.7	EDC	San Diego ske	OFF	1045 K



$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.7	EDC	Boivin 4step	OFF	1045 K
$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.7	EDC	Boivin 3step	OFF	1045 K
$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.9	EDM	globale	OFF	1045 K
$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.9	ED/FR	globale	OFF	1045 K
$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.9	EDC	globale	OFF	1045 K
$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.9	EDC	Li et al	OFF	1045 K
$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.9	EDC	San Diego	OFF	1045 K
$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.9	EDC	San Diego skeletal	OFF	1045 K
$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.9	EDC	Boivin 4step	OFF	1045 K
$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.9	EDC	Boivin 3step	OFF	1045 K
$k-\varepsilon$ standard	0.7	EDC	San Diego	ON	1045 K
$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.7	EDC	San Diego	ON	1045 K
$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.9	EDC	San Diego	ON	1045 K
$k-\varepsilon$ RNG	0.7	EDC	San Diego	OFF	1045 K
$k-\varepsilon$ RNG	0.9	EDC	San Diego	OFF	1045 K
$k-\varepsilon$ standard	0.7	EDC	San Diego	ON	1045 K
$k-\varepsilon$ standard	0.7	EDC	San Diego	ON	1045 K
$k-\varepsilon$ standard	0.7	EDC	San Diego	ON	1045 K
$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.9	EDC	globale	OFF	1035 K
$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.9	EDC	globale	OFF	1030 K

Tabella 2.12 Elenco simulazioni approccio *PDF transport*

Modello turbolenza	$Sc_t$	Modello interazione	Modello miscelamento	$C_\phi$	Tcoflow
$k-\varepsilon$ standard	0.7	PDF	MCurl	2	1045K
$k-\varepsilon$ standard	0.7	PDF	EMST	2	1045K
$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.9	PDF	MCurl	2	1040K
$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.9	PDF	MCurl	2.5	1040K
$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.9	PDF	MCurl	3	1040K
$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.9	PDF	EMST	2	1040K
$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.9	PDF	EMST	2.5	1040K
$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.9	PDF	EMST	3	1040K
$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.9	PDF	EMST	3	1035K
$k-\varepsilon C_{\varepsilon 1} = 1.6$	0.9	PDF	EMST	3	1030K

---

## 3 Risultati delle simulazioni

Di seguito sono riportati i risultati delle simulazioni suddivisi nei due approcci presentati in precedenza. I grafici sono relativi alle grandezze e alle specie di maggiore interesse. Il confronto con i dati sperimentali è effettuato anche in base alla frazione di miscela  $Z$ :

$$Z = \frac{\phi \frac{Y_F}{Y_{F,0}} - \frac{Y_O}{Y_{O,0}} + 1}{\phi + 1} \quad (3.1)$$

Prima è valutato l'effetto ei vari modelli considerando gli approcci EDM, E/FR ed EDC. Successivamente sono mostrati i risultati ottenuti con il modello PDF transport

### 3.1 Modelli EDM, ED/FR e EDC

#### 3.1.1 Effetto modello di interazione cinetica-turbolenza

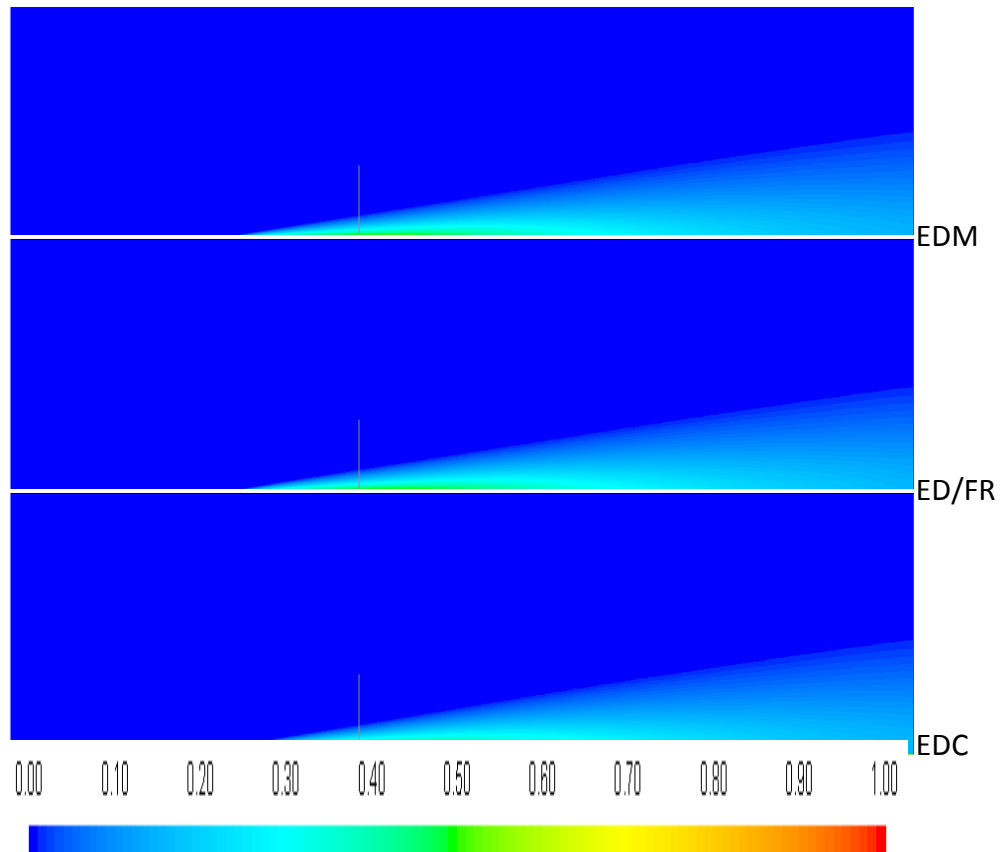
A parità di schema cinetico globale e di modello di turbolenza  $k-\epsilon$  standard, per prima cosa è stato valutato l'effetto del modello di interazione tra cinetica chimica e turbolenza.

Nella seguente Figura 3.1 sono presentati i contours della frazione di miscela dove è indicata la distanza assiale  $x/d=10$  in corrispondenza della quale si stabilizza la fiamma. Nessuno dei tre modelli sembra predire una *lifted flame*. Si può notare inoltre come i modelli Eddy Dissipation e Eddy Dissipation/Finite Rate producano una fiamma di lunghezza maggiore rispetto all'Eddy Dissipation Concept.

Successivamente sono stati analizzati i profili radiali della frazione di miscela in corrispondenza delle diverse distanze assiali cui sono disponibili le misurazioni sperimentali, nonché lungo la direzione assiale (Figura 3.2). L'andamento dei profili prodotti dai tre modelli è all'incirca il medesimo; in particolare, mentre per la prima porta si adattano molto bene ai dati sperimentali, alle distanze successive si ha uno scostamento maggiore soprattutto allontanandoci in direzione radiale. Per l'ultima distanza assiale  $x/d=26$  i risultati delle simulazioni sottostimano l'andamento vicino all'asse e lo sovrastimano oltre i 10mm di distanza dall'asse. Infine il profilo assiale sembra seguire in modo accettabile i risultati sperimentali anche se presenta un distacco rispetto a quest'ultimi con l'aumentare della distanza dall'uscita dell'ugello.

Per quanto riguarda la temperatura, dai contours di Figura 3.3 si nota come il modello EDC presenti picchi di temperatura più bassi rispetto a quelli predetti dall'EDM e dall'ED/FR.

In ogni caso nella successiva Figura 3.4 si vede come l'accensione della fiamma sia anticipata rispetto alla sperimentale, a conferma di quanto precedentemente osservato. In particolare, il modello EDC è quello che si avvicina maggiormente ai valori sperimentali mentre l'EDM è il più lontano.



**Figura 3.1** Contours della *mixture fraction* nel caso di meccanismo globale, modello di turbolenza k- $\epsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del modello di interazione cinetica-turbolenza.

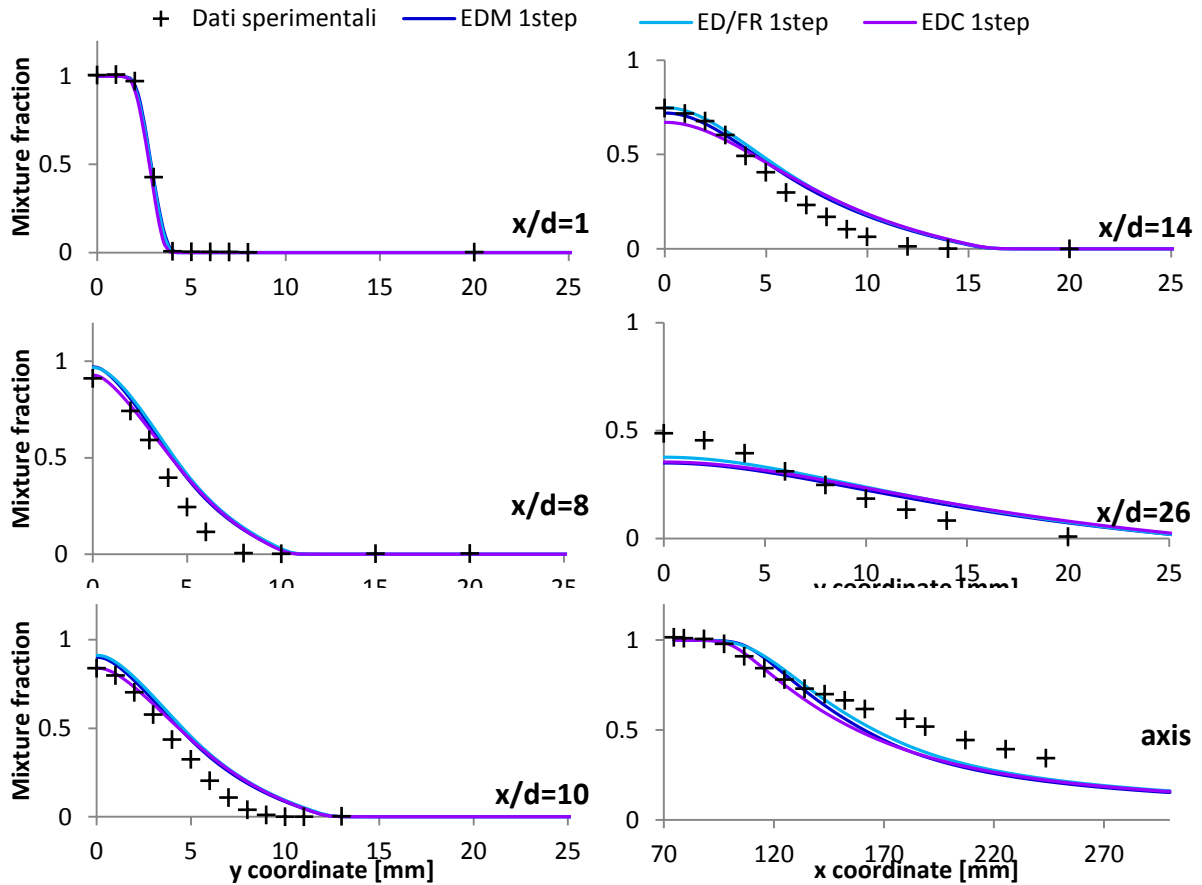


Figura 3.2 Profili *mixture fraction* nel caso di meccanismo globale, modello di turbolenza  $k-\varepsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del modello di interazione cinetica-turbolenza.

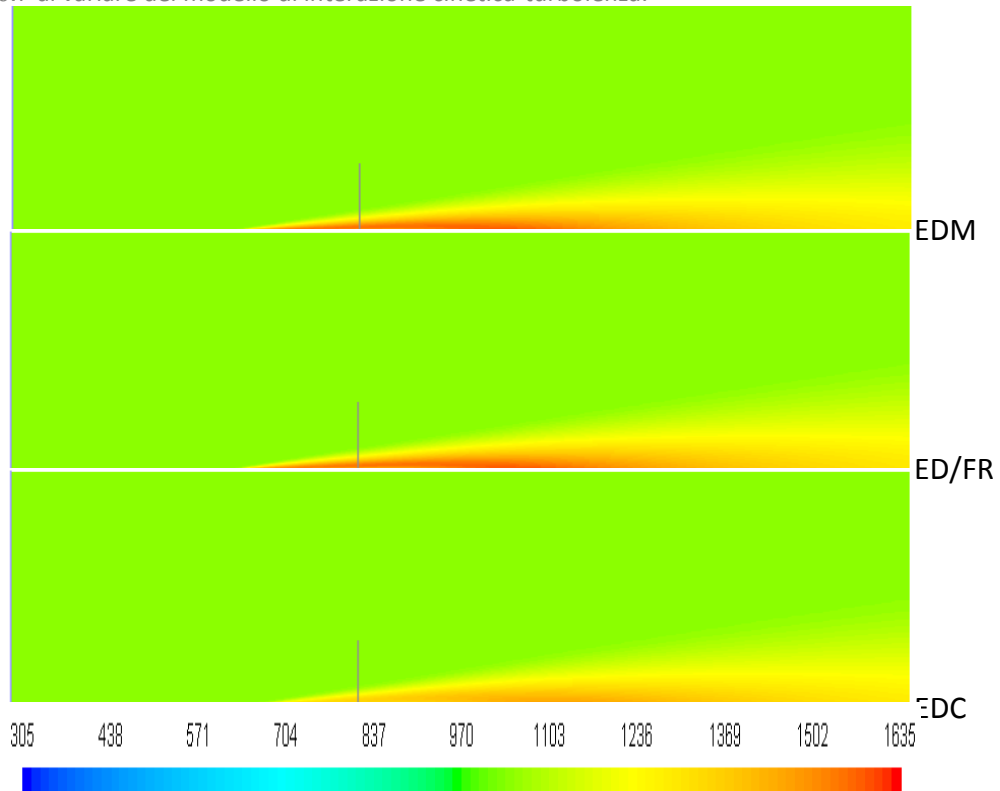


Figura 3.3 Contours della temperatura nel caso di meccanismo globale, modello di turbolenza  $k-\varepsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del modello di interazione cinetica-turbolenza.

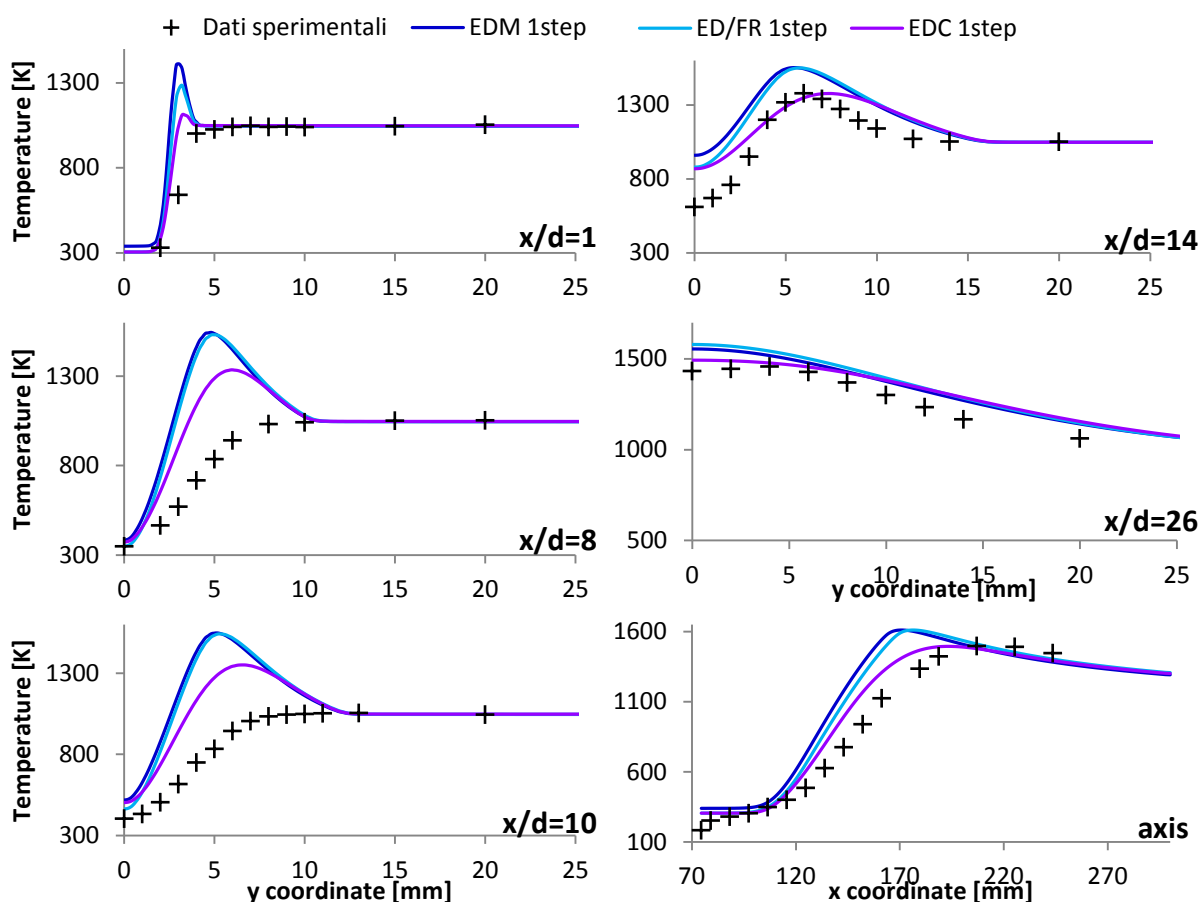
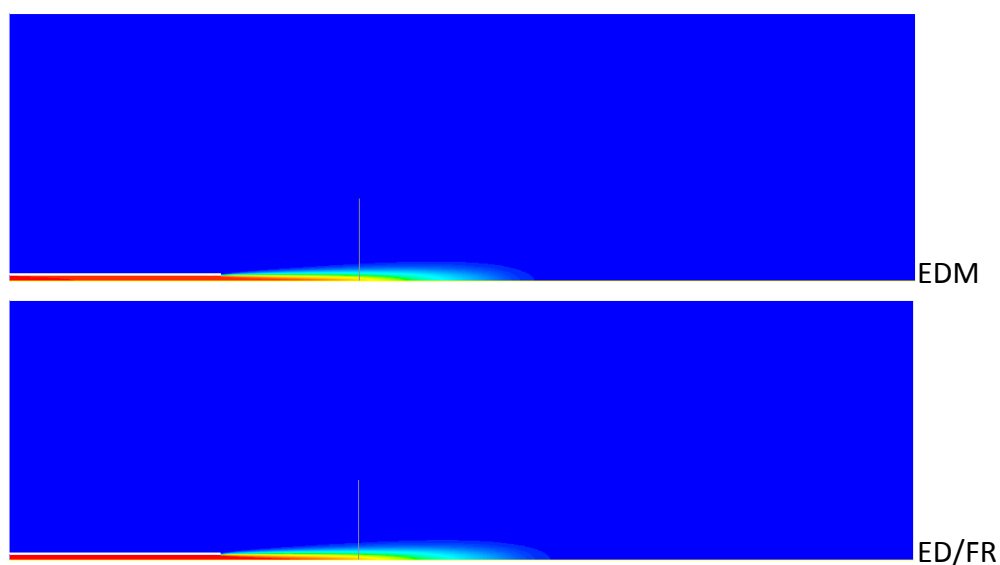
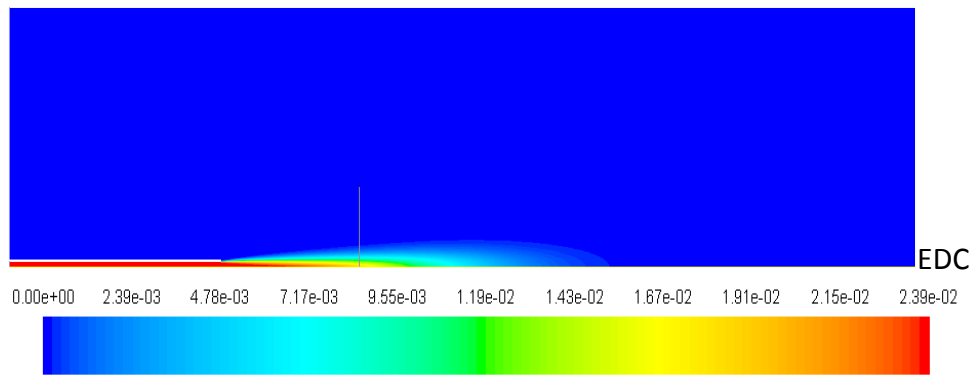


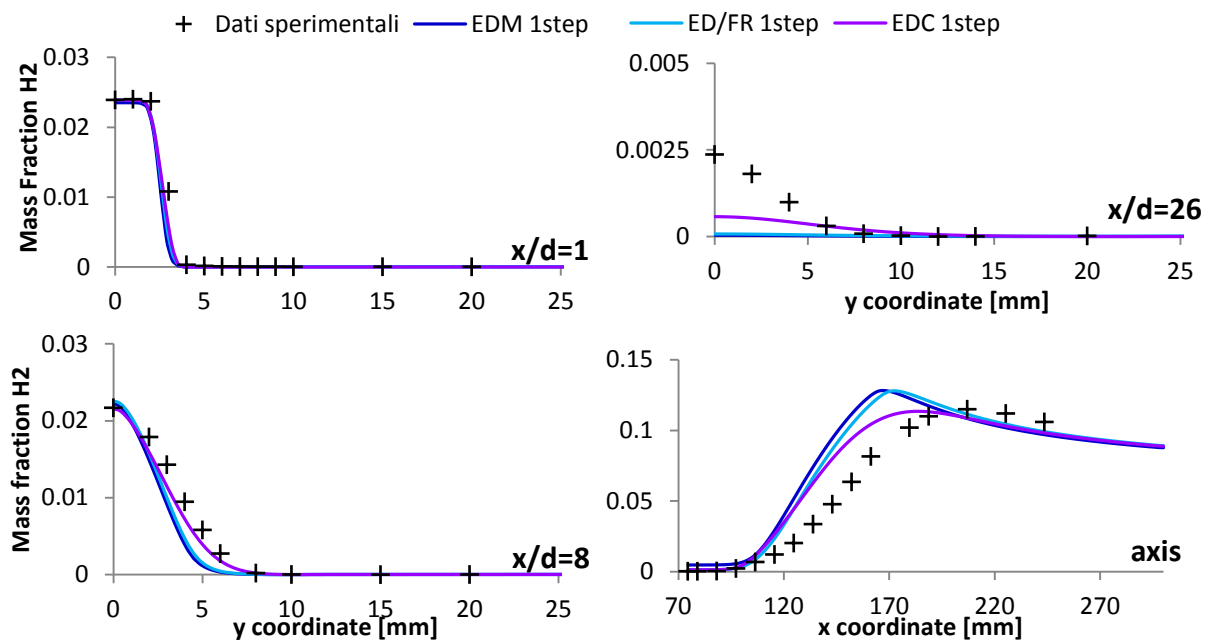
Figura 3.4 Profili temperatura nel caso di meccanismo globale, modello di turbolenza  $k-\varepsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del modello di interazione cinetica-turbolenza.

Nelle successive Figura 3.5 e Figura 3.6 sono riportati i contours e i profili della frazione massica della specie  $H_2$  e nelle Figura 3.7 e Figura 3.8 dell' $H_2O$  che si discostano anch'essi dai valori sperimentali.

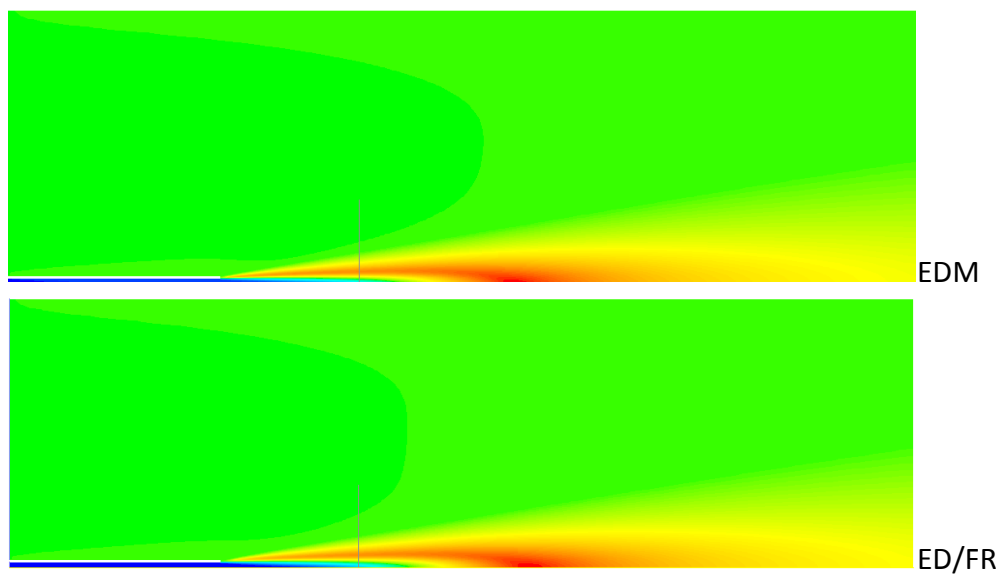


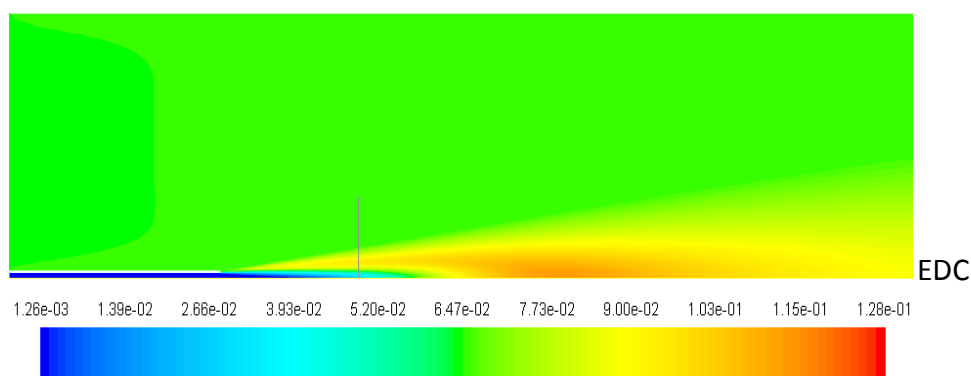


**Figura 3.5** Contours della frazione massica di  $H_2$  nel caso di meccanismo globale, modello di turbolenza  $k-\varepsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del modello di interazione cinetica-turbolenza.

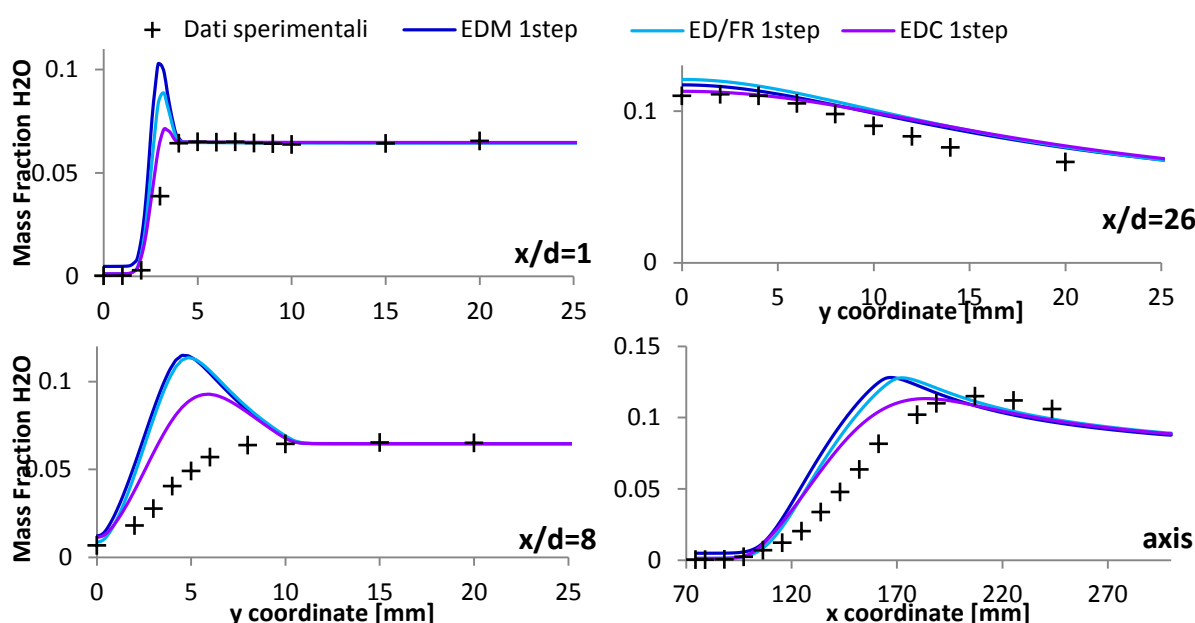


**Figura 3.6** Profili frazione massica  $H_2$  nel caso di meccanismo globale, modello di turbolenza  $k-\varepsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del modello di interazione cinetica-turbolenza.





**Figura 3.7** Contours della frazione massica di  $H_2O$  nel caso di meccanismo globale, modello di turbolenza  $k-\varepsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del modello di interazione cinetica-turbolenza.



**Figura 3.8** Profili frazione massica  $H_2O$  nel caso di meccanismo globale, modello di turbolenza  $k-\varepsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del modello di interazione cinetica-turbolenza.

### 3.1.2 Effetto meccanismo cinetico

Il meccanismo di interazione EDC appare il migliore per quanto riguarda i risultati delle simulazioni ottenuti utilizzando uno schema cinetico globale, inoltre tale modello è quello che permette l'implementazione di schemi cinetici ridotti.

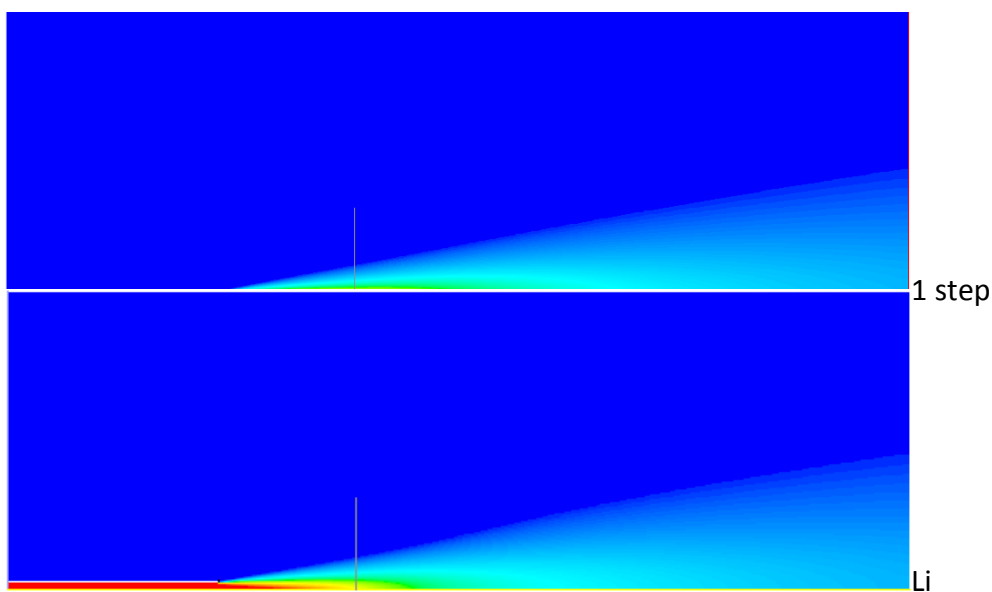
La distribuzione e i profili radiali e assiali della frazione di miscela (Figura 3.9 e Figura 3.10) non sembrano risentire molto della variazione dello schema cinetico implementato; infatti le distribuzioni si assomigliano nonostante si noti un accorciamento della zona centrale con frazione di miscela pari a 0.5 con l'aumentare del numero delle reazioni comprese nello schema cinetico mentre i profili radiali seguono tutti lo stesso andamento: nelle immediate vicinanze dell'uscita dell'ugello ( $x/d=1$ ) sono molto aderenti ai valori sperimentali e con lo spostarsi verso valle si ha un distacco rispetto all'andamento sperimentale che è maggiore con la distanza dall'asse ( $x/d=8$ ), infine per valori ancora più lontani dall'ugello ( $x/d=10$ ,  $x/d=14$  e  $x/d=26$ ), il profilo appare più schiacciato risultando sottostimato nelle vicinanze

dell'asse e sovrastimato allontanadoci da esso. Il profilo assiale rispecchia molto quello sperimentale nel primo tratto vicino all'ugello ma poi subisce una deflessione con l'aumentare della coordinata assiale.

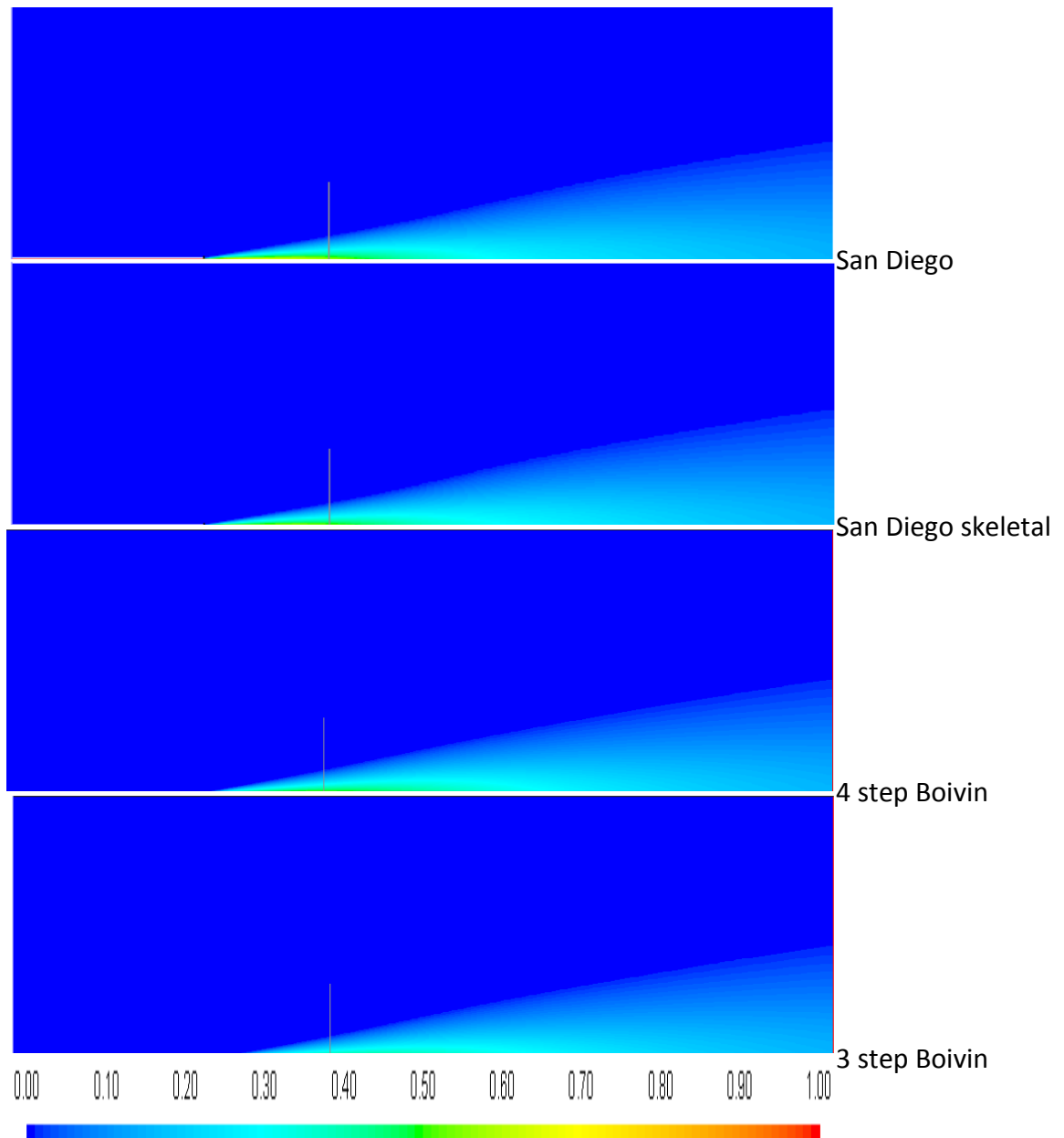
Nelle figure Figura 3.11 e Figura 3.12 relative alla temperatura, si riscontrano le maggiori differenze. La prima caratteristica che nei meccanismi dettagliati e ridotti differisce rispetto al caso di schema cinetico globale è una temperatura inferiore.

Nel caso dei meccanismi ridotti a 3 e 4 step secondo Boivin si nota un leggero distaccamento della base della fiamma i cui profili di temperatura seguono molto i dati sperimentali soprattutto per quel che concerne l'andamento assiale, ma non sono adeguato ai valori radiali nelle zone più lontane dall'uscita del getto di combustibile.

I meccanismi dettagliati secondo gli schemi cinetici Li, San Diego e San Diego skeletal forniscono una distribuzione di temperatura per la quale si avrebbe la base della fiamma ad una altezza circa doppia rispetto al caso sperimentale, e di conseguenza i profili radiali e assiale sono sottostimati.







**Figura 3.9** Contours *mixture fraction* nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza  $k-\varepsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del meccanismo cinetico.

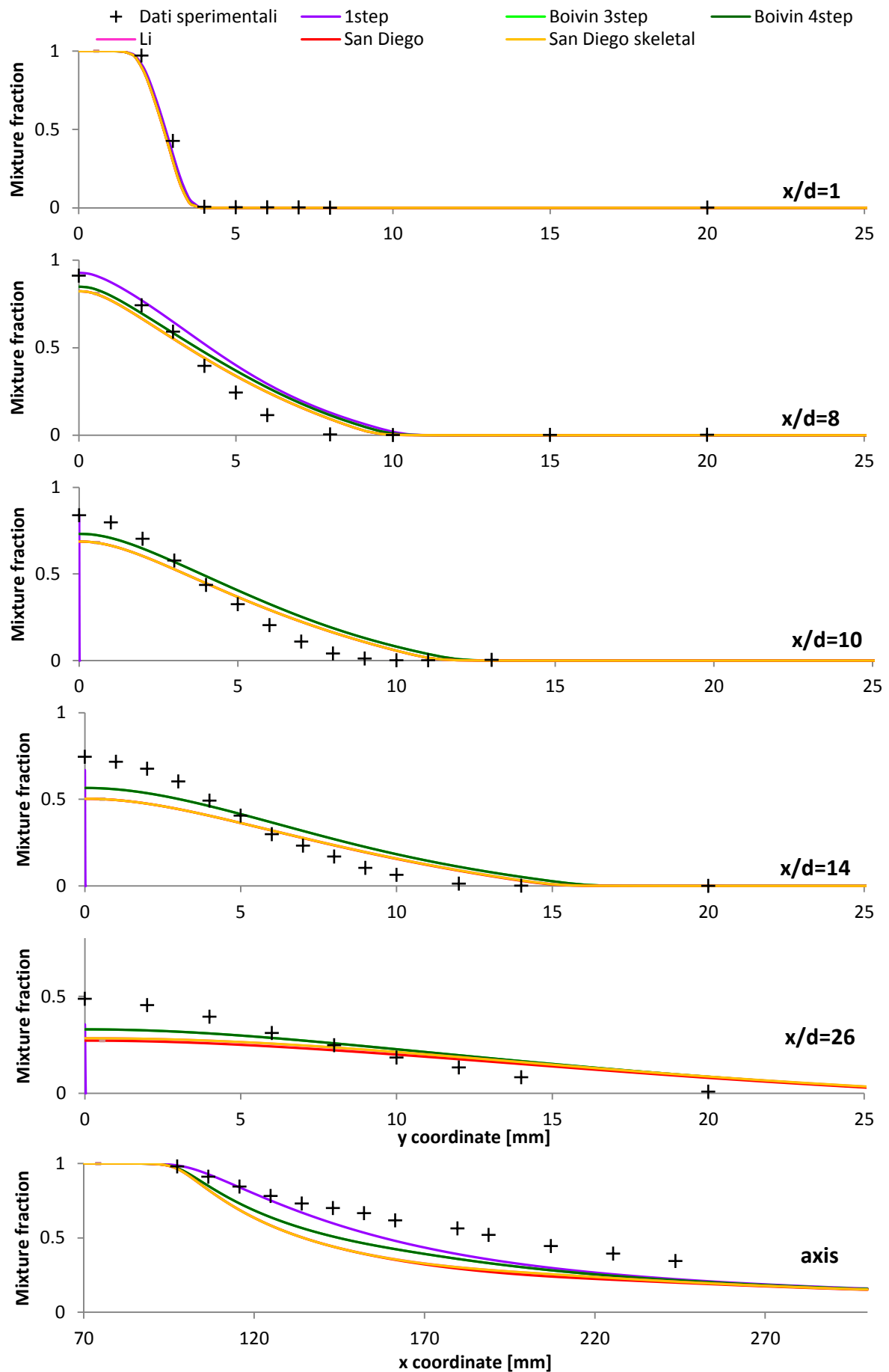
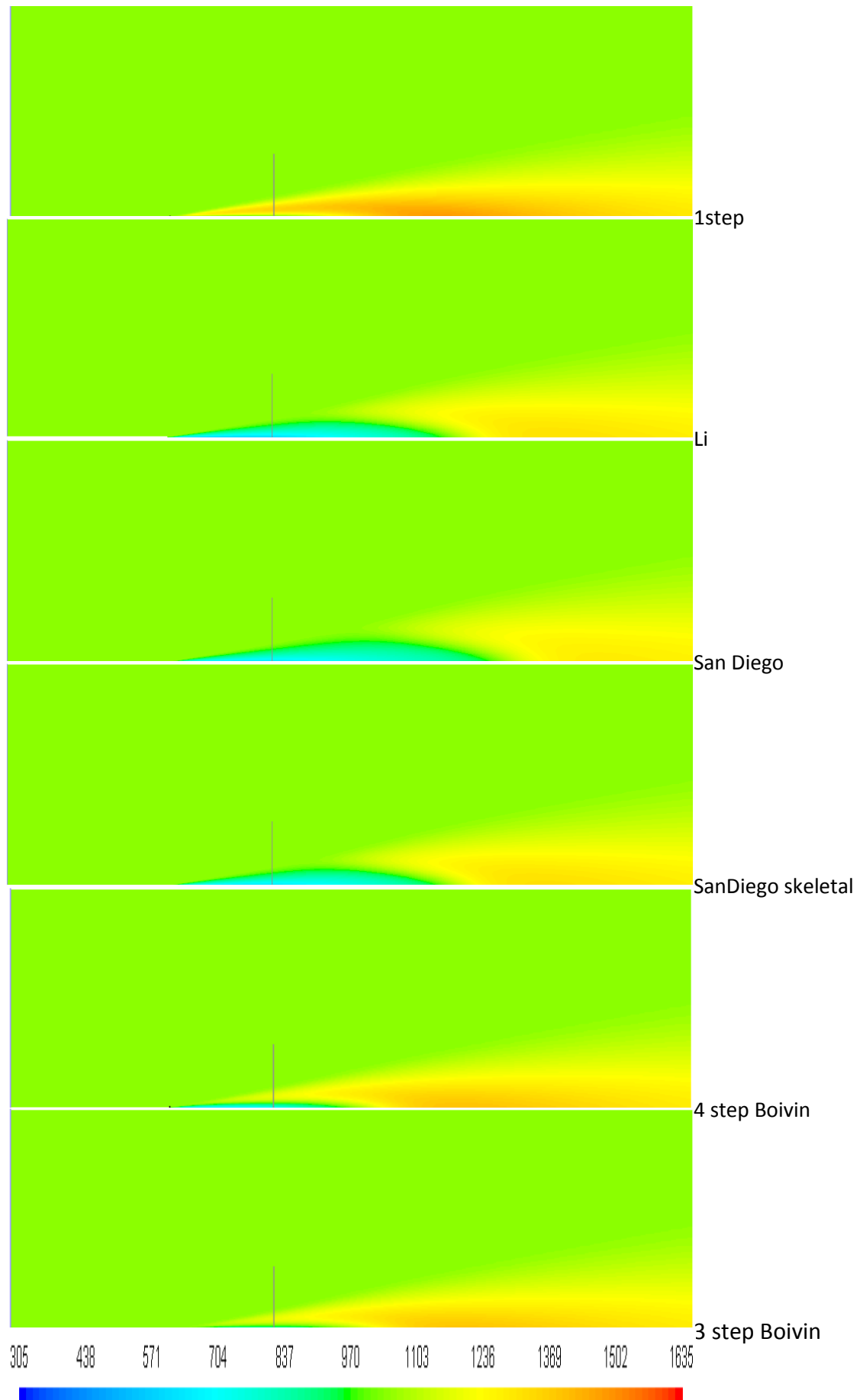


Figura 3.10 Profili *mixture fraction* nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza  $k-\varepsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del meccanismo cinetico.



**Figura 3.11** Contours della temperatura nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza  $k-\epsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del meccanismo cinetico.

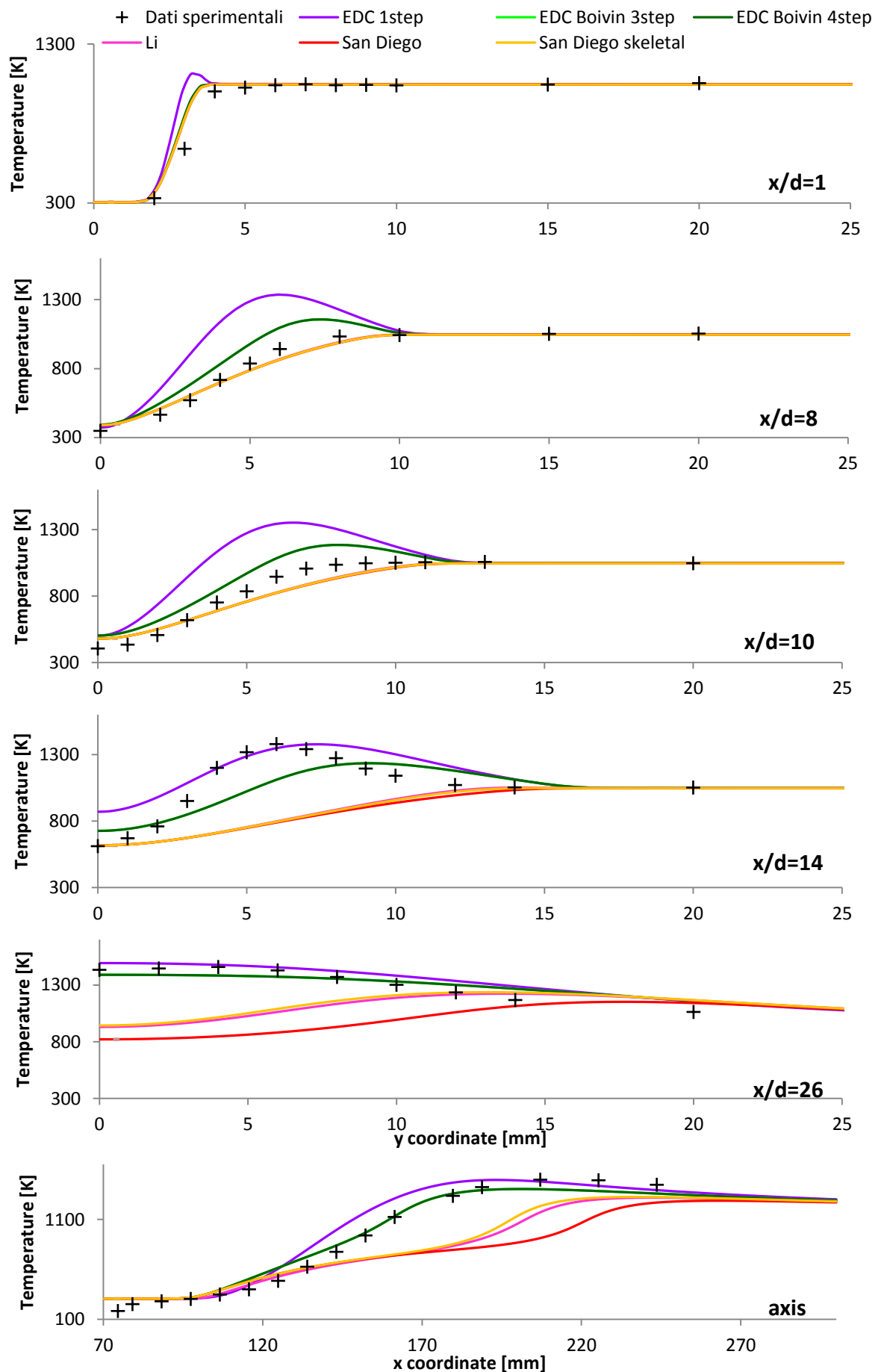
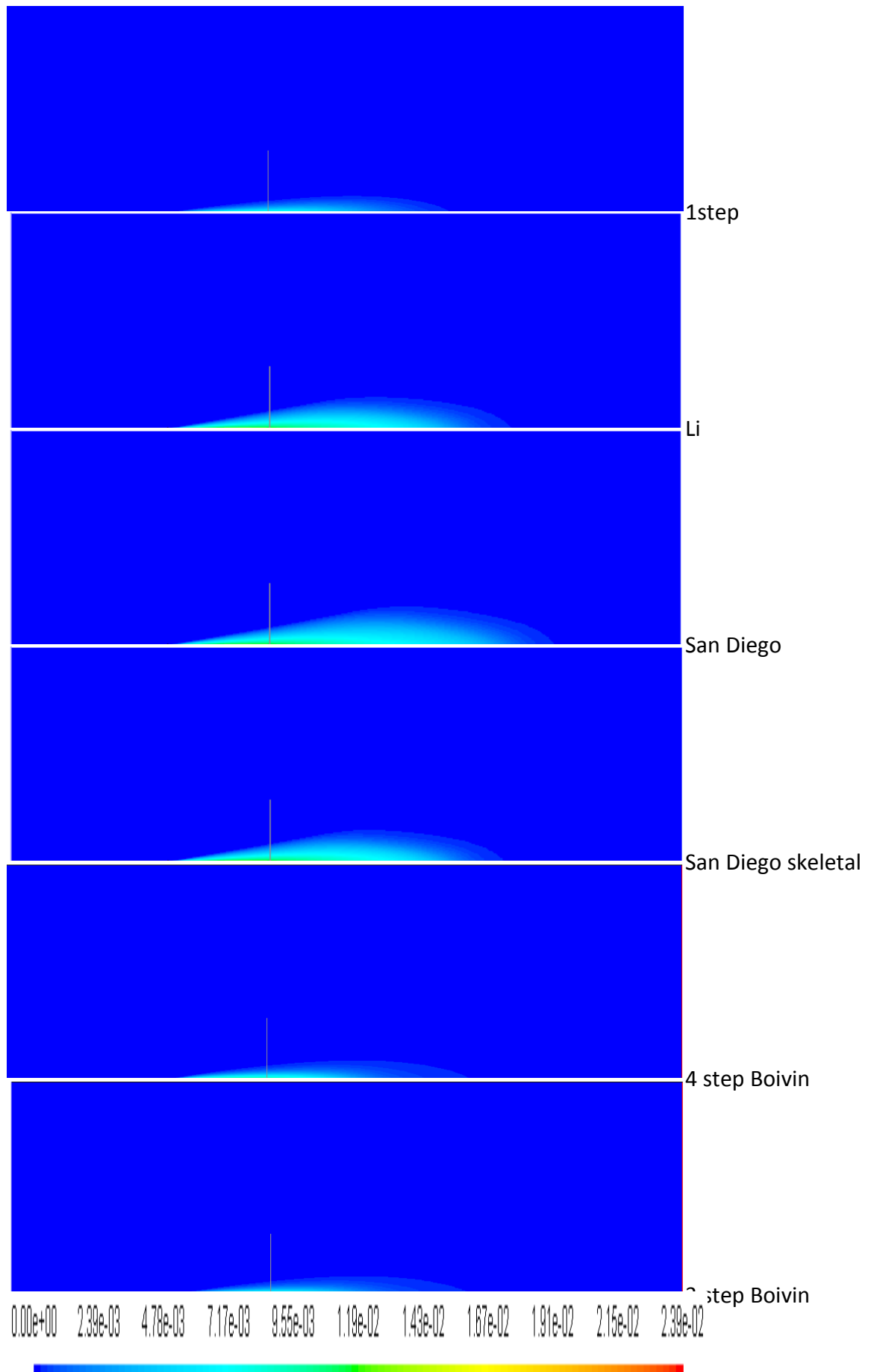


Figura 3.12 Profili temperatura nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza  $k-\varepsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del meccanismo cinetico.



**Figura 3.13** Contours frazione massica  $H_2$  nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza  $k$ - $\epsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del meccanismo cinetico

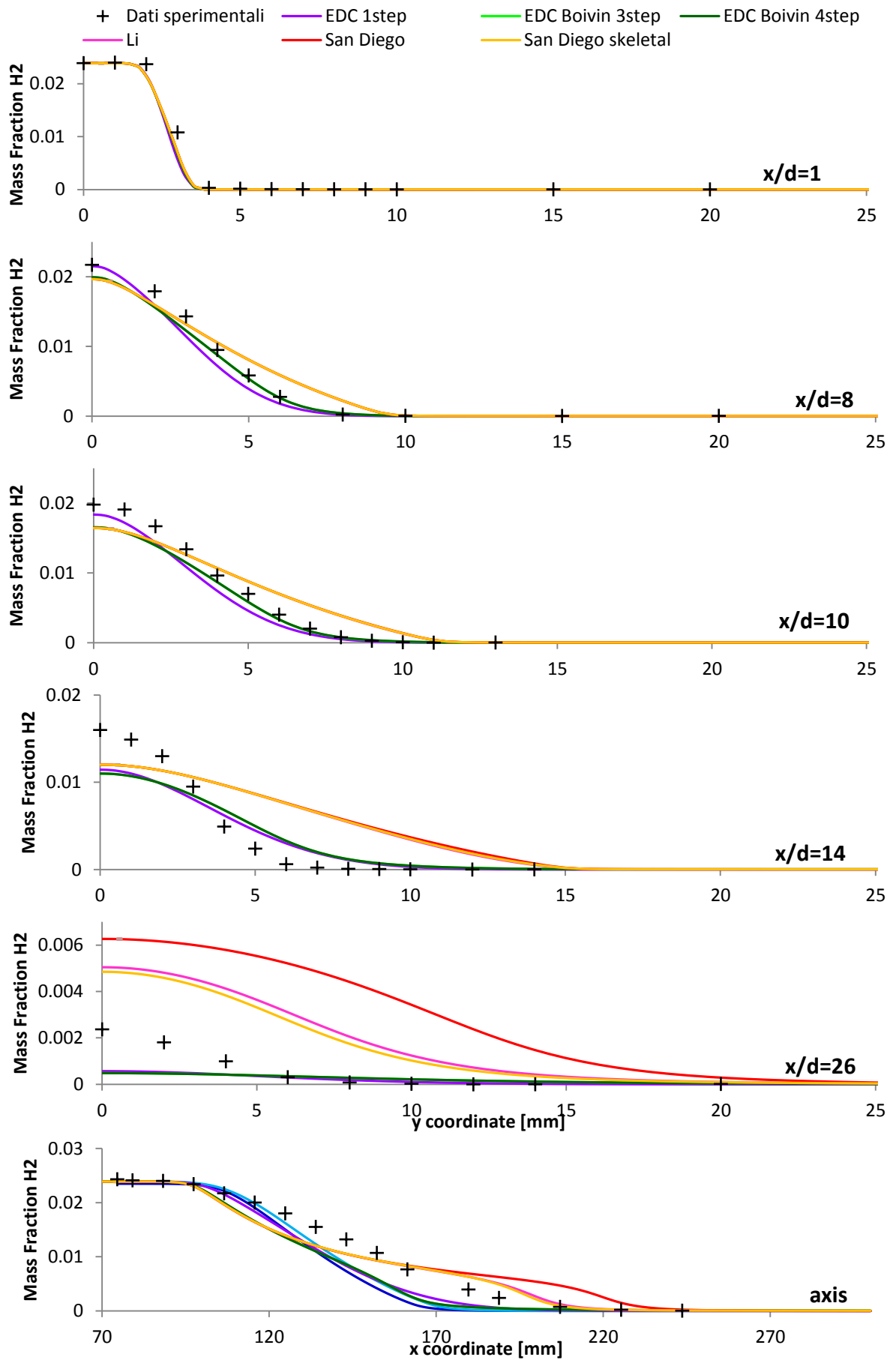


Figura 3.14 Profili frazione massica  $H_2$  nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza  $k-\epsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del meccanismo cinetico

Nel caso dei meccanismi dettagliati, non rispecchiando i profili di temperatura, neanche per la distribuzione e gli andamenti del radicale OH si ottengono dei risultati accettabili.

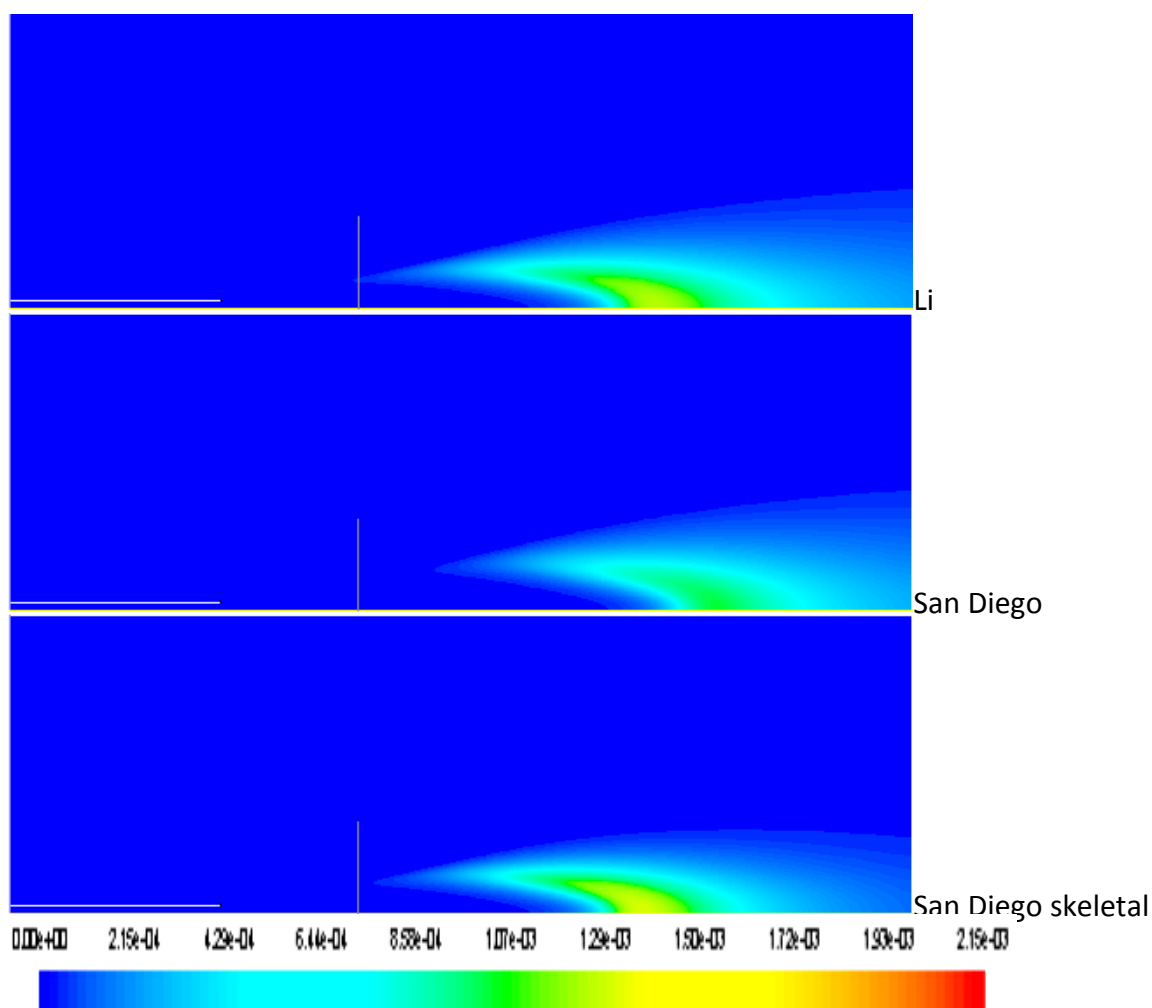


Figura 3.15 Contours frazione massica OH nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza  $k-\epsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del meccanismo cinetico

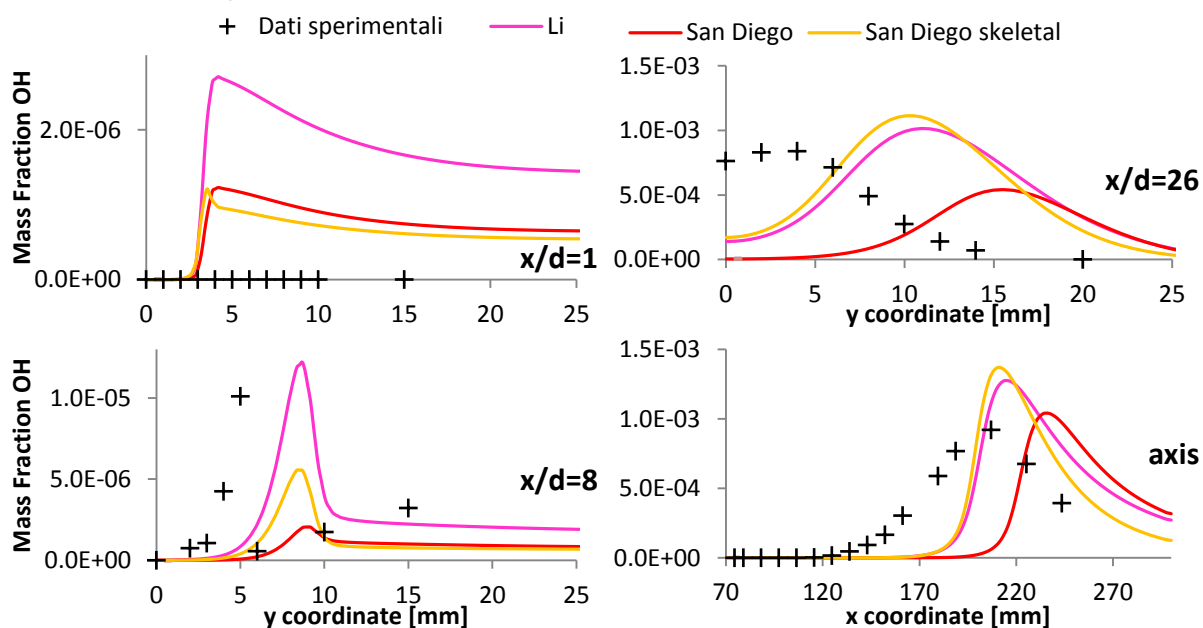


Figura 3.16 Profili frazione massica OH nel caso modello di turbolenza  $k-\epsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del meccanismo cinetico

### 3.1.3 Effetto costante $C_{\epsilon 1}$ del modello di turbolenza

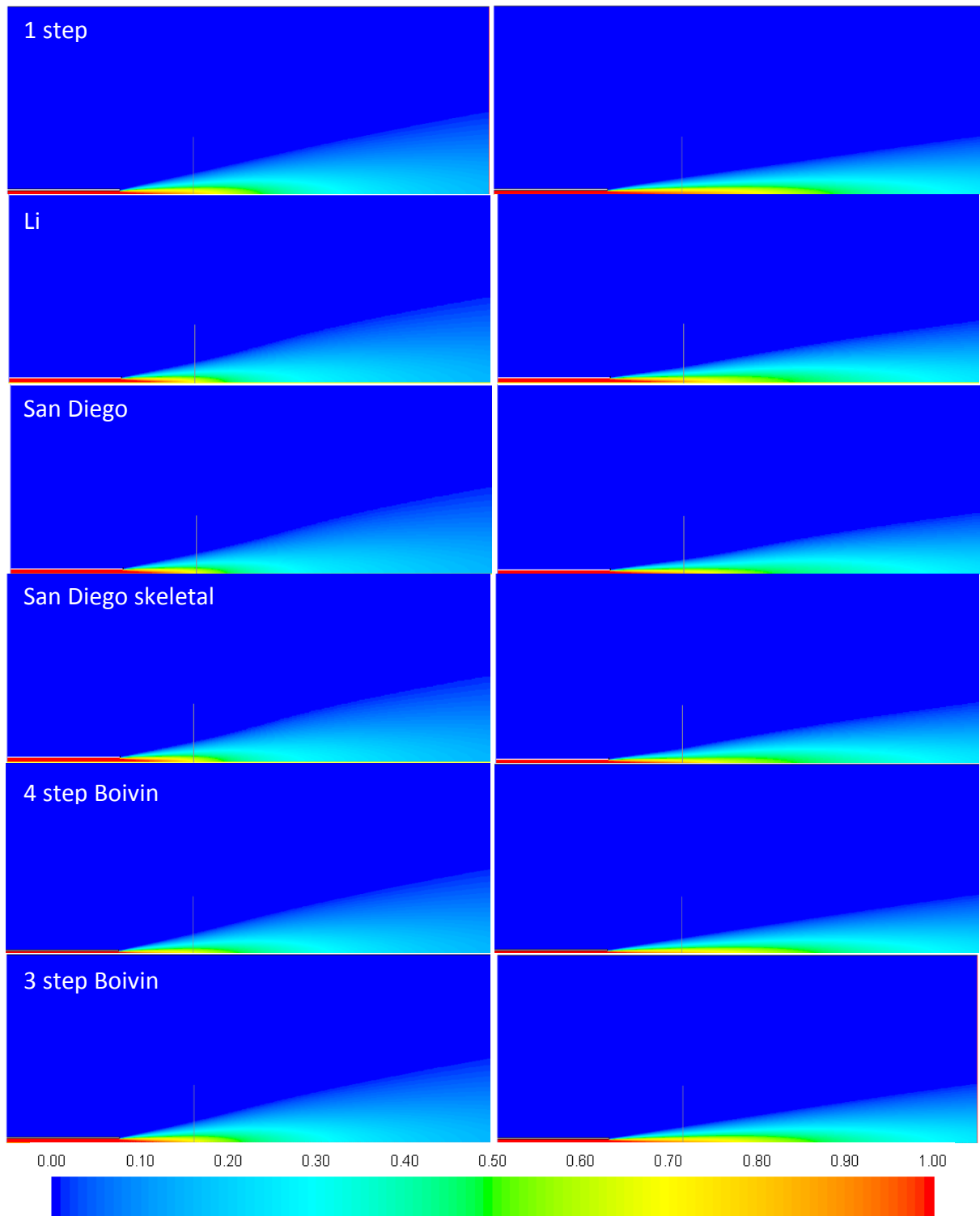
Nel caso di getti circolari, spesso viene adottato il modello di turbolenza  $k-\epsilon$  standard modificato nel valore della costante  $C_{\epsilon 1}$  che è portato dal valore standard di 1.44 a 1.6. Tale modifica è stata proposta per getti non reattivi in modo da ovviare alla sovrastima da parte del modello  $k-\epsilon$  standard del tasso di decadimento del getto.

Nelle seguenti figure si nota come i contorni della frazione di miscela (Figura 3.17) subiscano una riduzione dell'angolo di aperture del getto con l'aumento di  $C_{\epsilon 1}$ , questo porta a una migliore aderenza dei profili nei confronti dei dati sperimentali (Figura 3.18).

Anche i profili di temperatura subiscono notevoli modifiche: la fiamma è meno aperta in direzione radiale e l'altezza di sollevamento risulta ridotta (Figura 3.19). In particolare, per gli schemi cinetici Li e San Diego skeletal l'altezza di sollevamento è molto prossima a quella misurata sperimentalmente. Osservando i profili radiali e assiale (Figura 3.20) si nota sicuramente una migliore aderenza ai profili misurati rispetto al caso standard  $C_{\epsilon 1}=1.44$  ma fino a 10 diametri di distanza dall'uscita del getto, gli schemi cinetici dettagliati producono buoni risultati mentre il globale e i ridotti sovrastimano la temperatura a causa della minore altezza di sollevamento, ma con l'aumentare della distanza neanche gli schemi cinetici dettagliati risultano essere soddisfacenti.

Questo indica un profilo di fiamma diverso da quello sperimentale ed è confermato dalla discrepanza dei profili delle specie minori  $H_2$  e  $OH$  (Figura 3.22 e Figura 3.24) i cui contorni sono rappresentati nelle Figura 3.23 e Figura 3.25.





**Figura 3.17** Contours *mixture fraction* nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza  $k-\epsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del meccanismo cinetico I contours di sinistra sono relativi al caso con  $C_{\epsilon 1}=1.44$ , mentre a destra al caso  $C_{\epsilon 1}=1.6$ .

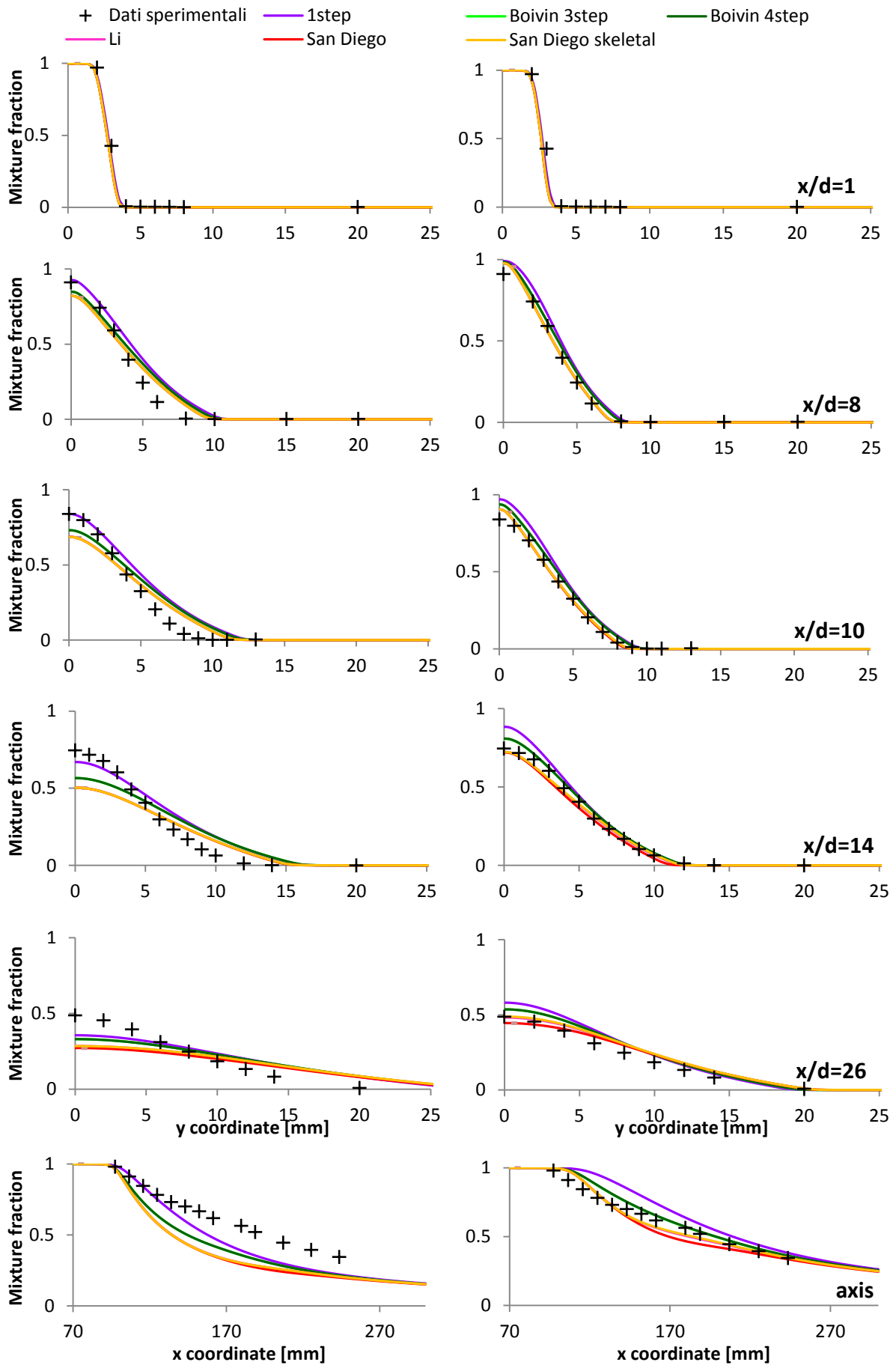
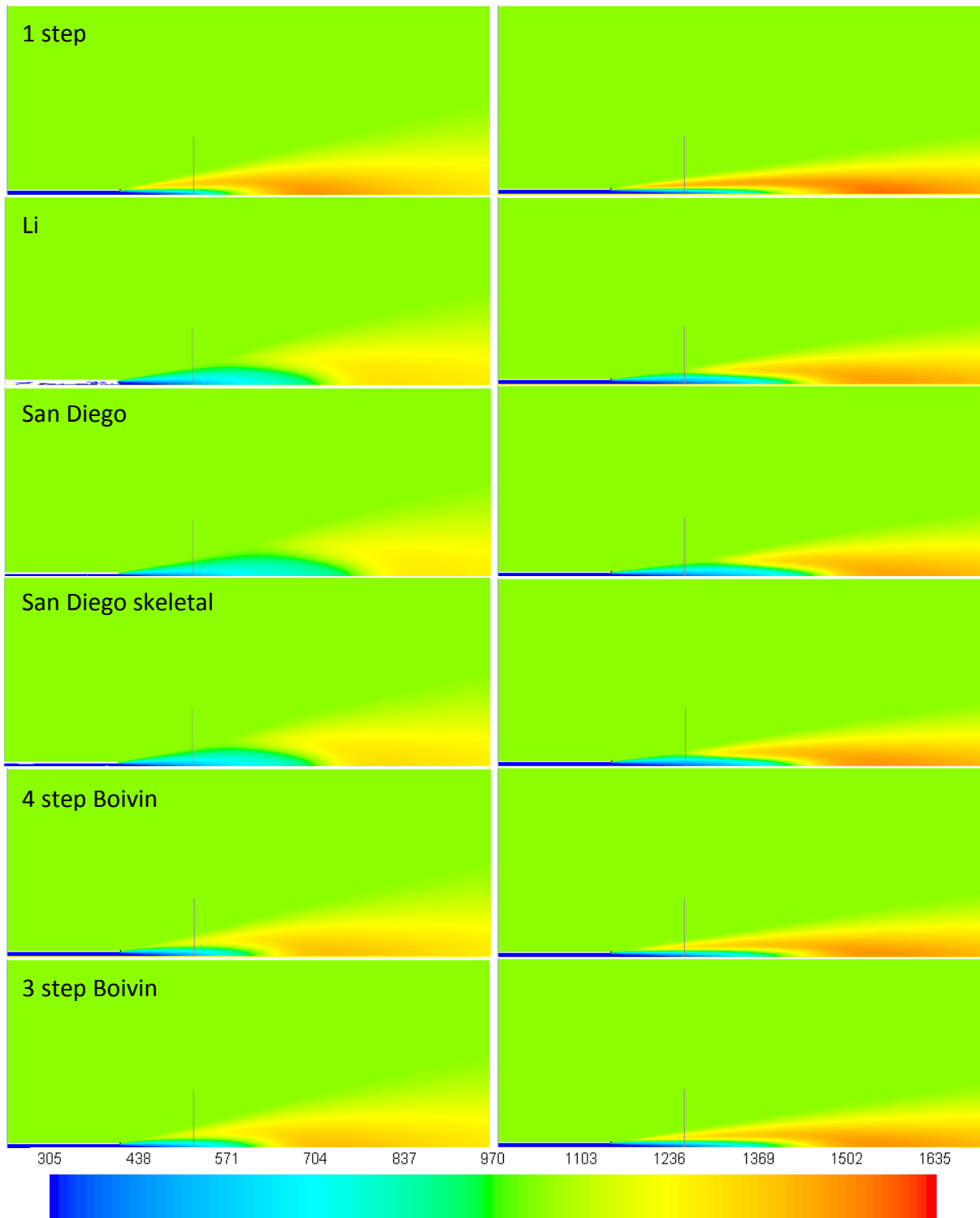


Figura 3.18 Profili *mixture fraction* nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza  $k-\varepsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del meccanismo cinetico I contours di sinistra sono relativi al caso con  $C_{\varepsilon 1}=1.44$ , mentre a destra al caso  $C_{\varepsilon 1}=1.6$ .



**Figura 3.19** Contours temperatura nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza  $k-\epsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del meccanismo cinetico. I contours di sinistra sono relativi al caso con  $C_{\epsilon 1}=1.44$ , mentre a destra al caso  $C_{\epsilon 1}=1.6$ .

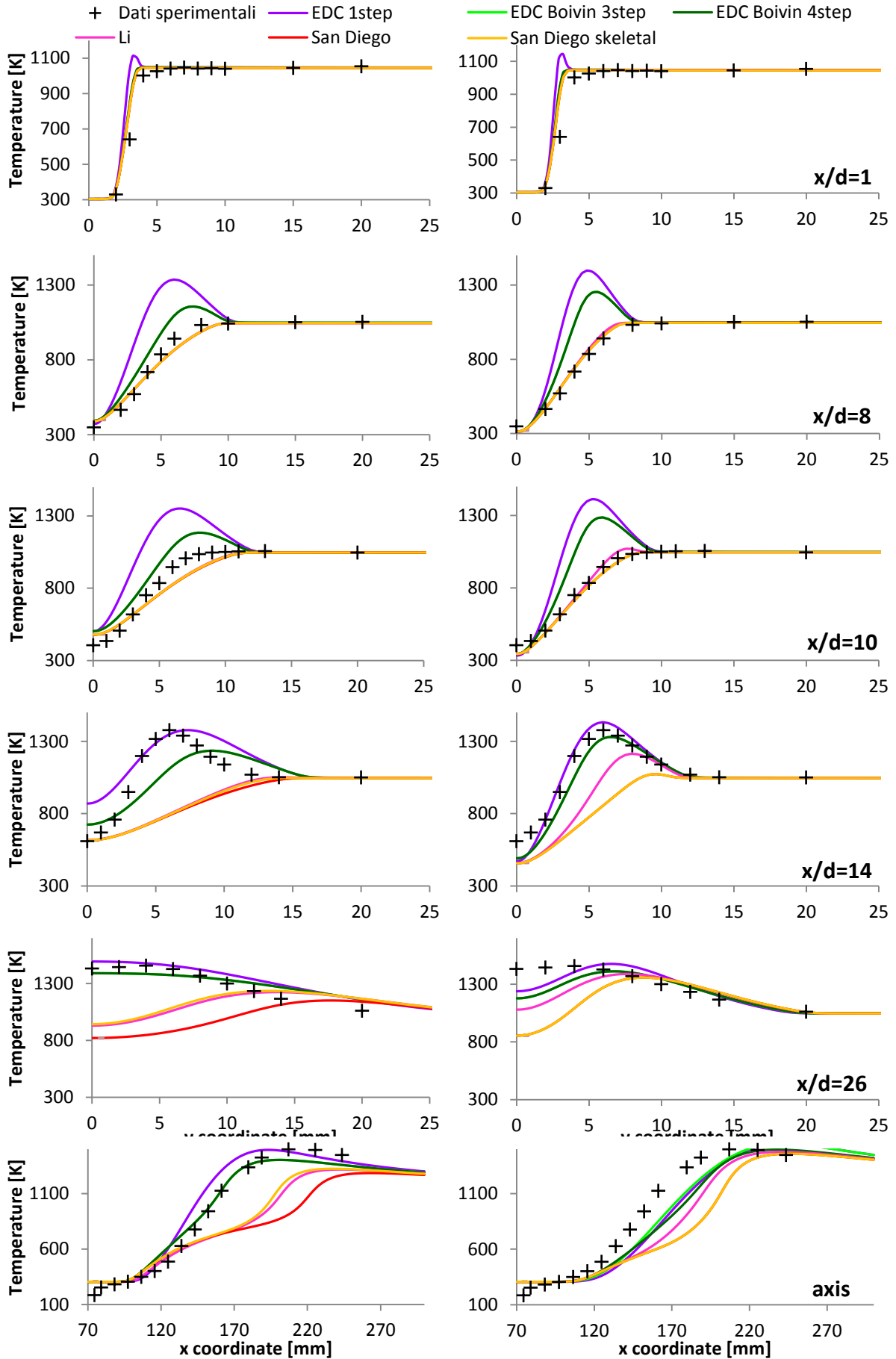
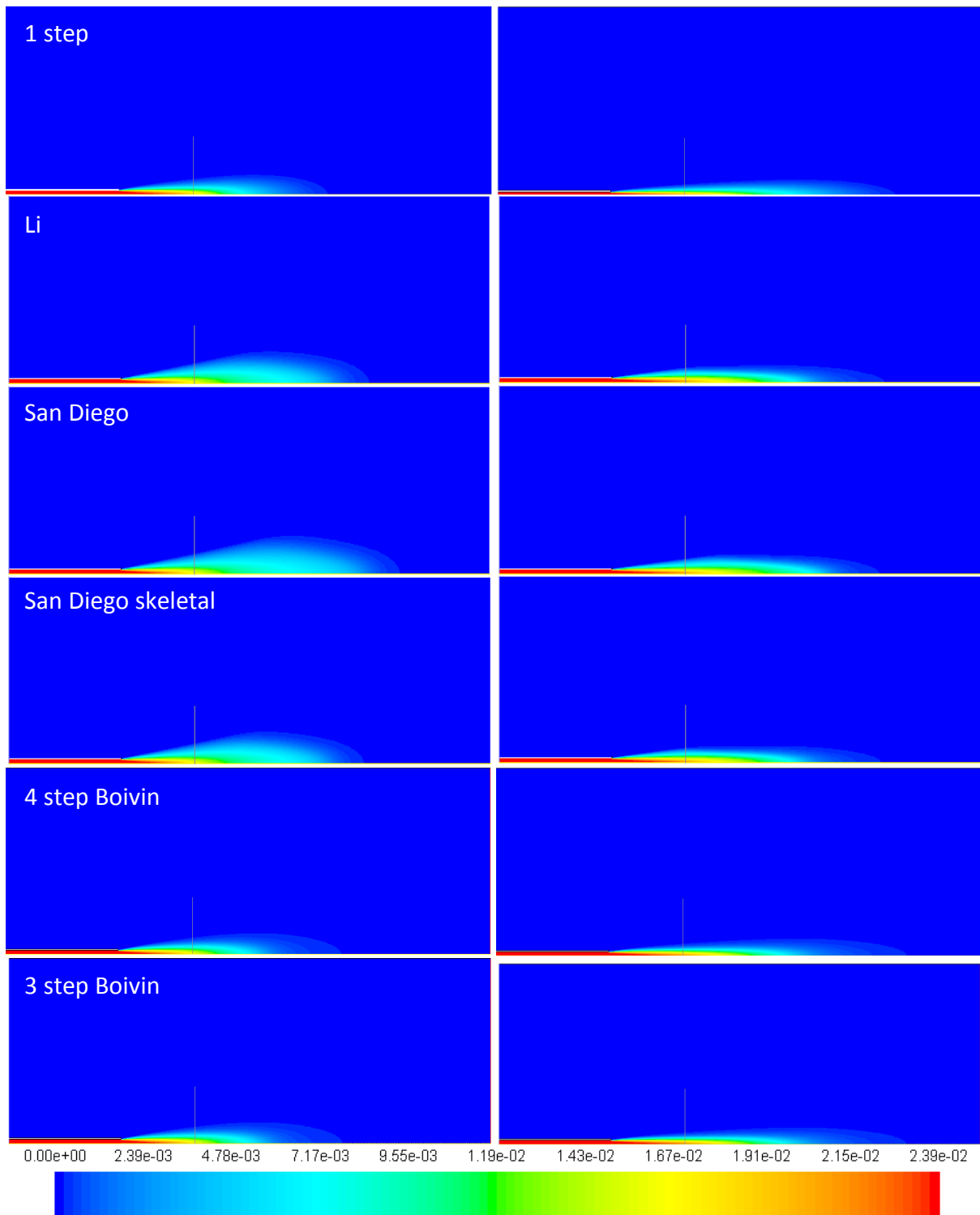


Figura 3.20 Profili temperature nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza k-ε standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del meccanismo cinetico. I contours di sinistra sono relativi al caso con  $C_{\epsilon 1} = 1.44$ , mentre a destra al caso  $C_{\epsilon 1} = 1.6$ .



**Figura 3.21** Contours frazione massa  $H_2$  nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza  $k-\epsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del meccanismo cinetico. I contours di sinistra sono relativi al caso con  $C_{\epsilon 1} = 1.44$ , mentre a destra al caso  $C_{\epsilon 1} = 1.6$ .

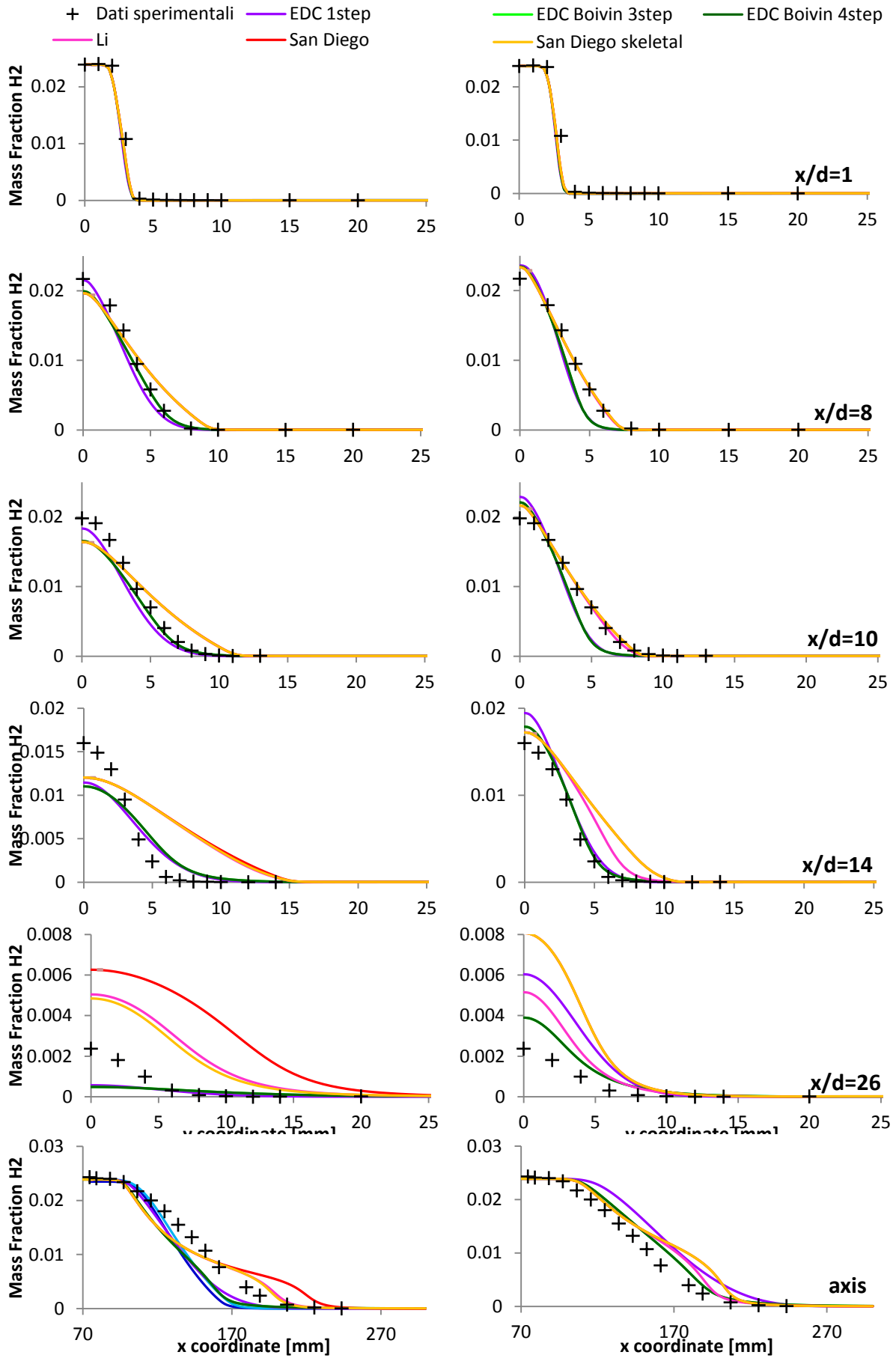


Figura 3.22 Profili frazione massica H<sub>2</sub> nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza k- $\varepsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del meccanismo cinetico. I contours di sinistra sono relativi al caso con  $C_{\varepsilon 1}=1.44$ , mentre a destra al caso  $C_{\varepsilon 1}=1.6$ .

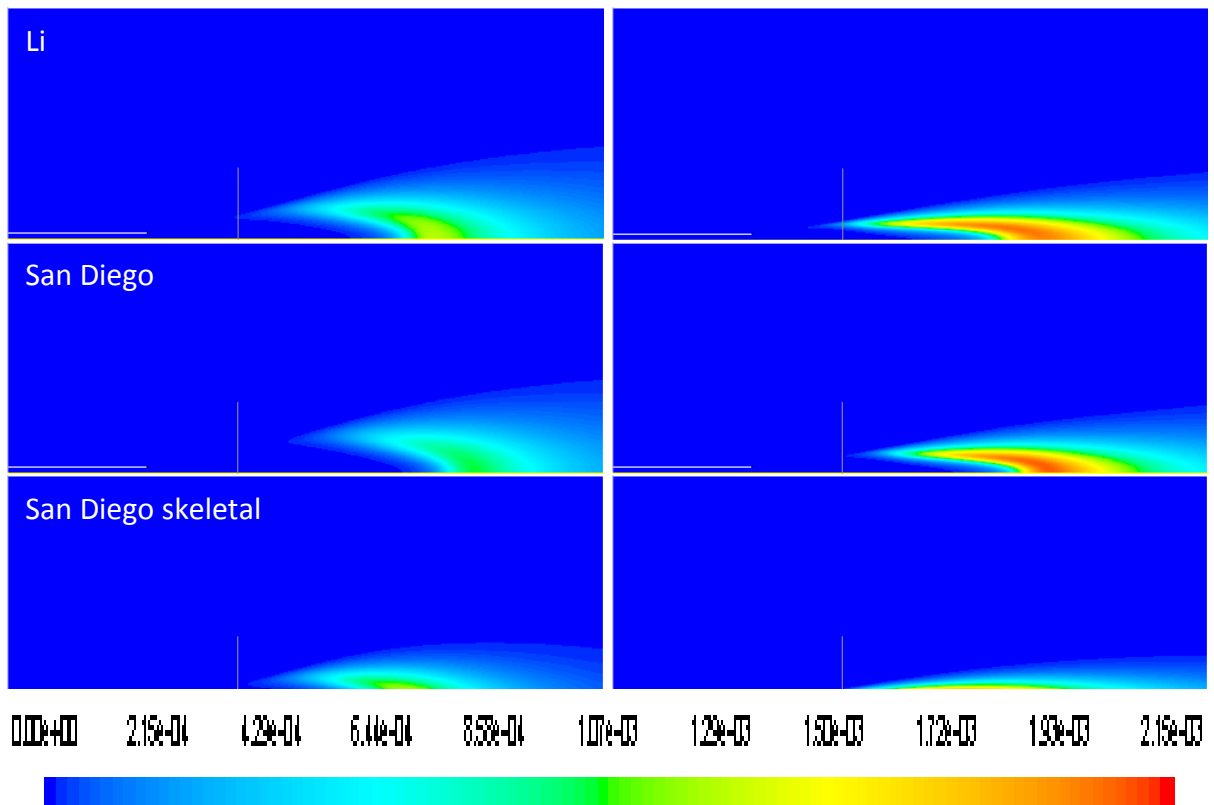
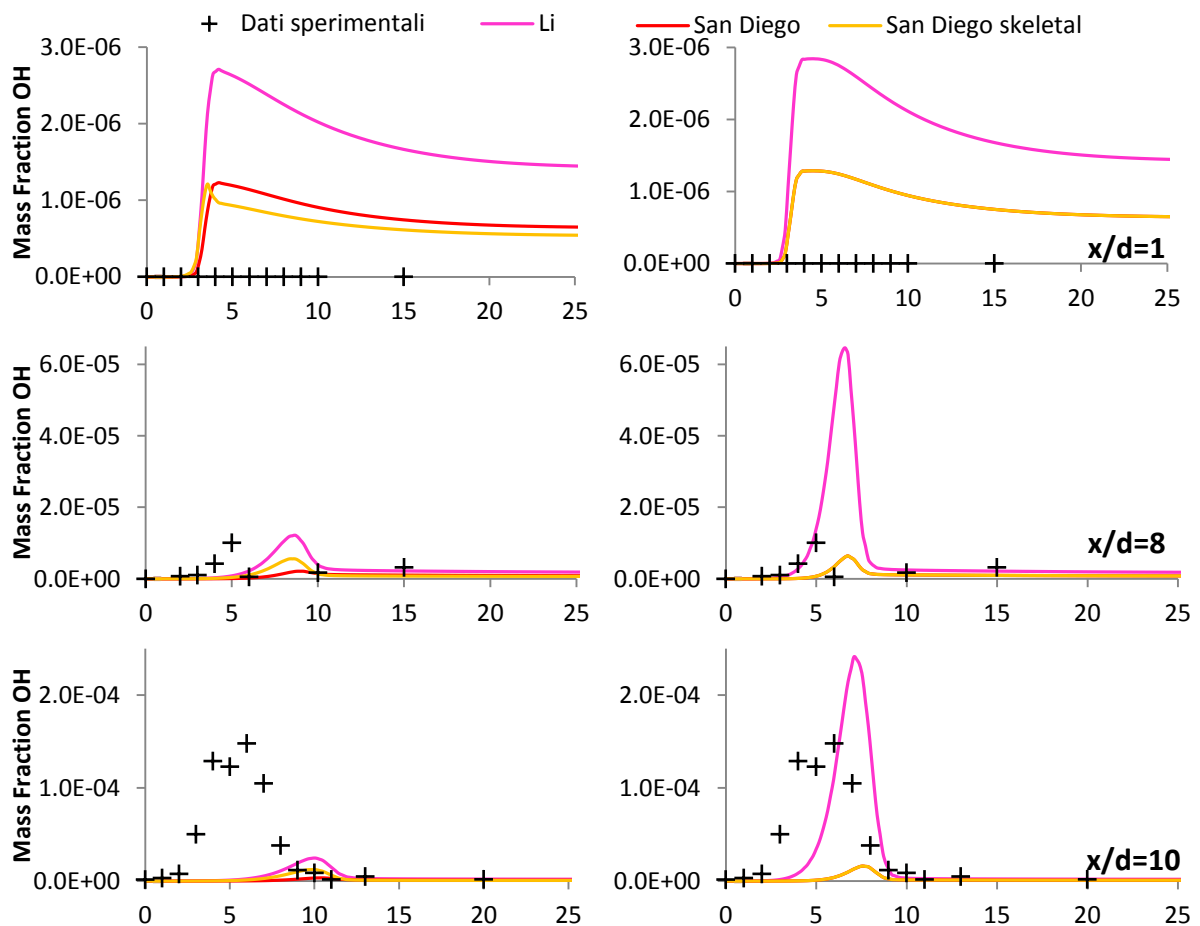


Figura 3.23 Contours frazione massica OH nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza  $k-\varepsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del meccanismo cinetico. I contours di sinistra sono relativi al caso con  $C_{\varepsilon 1}=1.44$ , mentre a destra al caso  $C_{\varepsilon 1}=1.6$ .



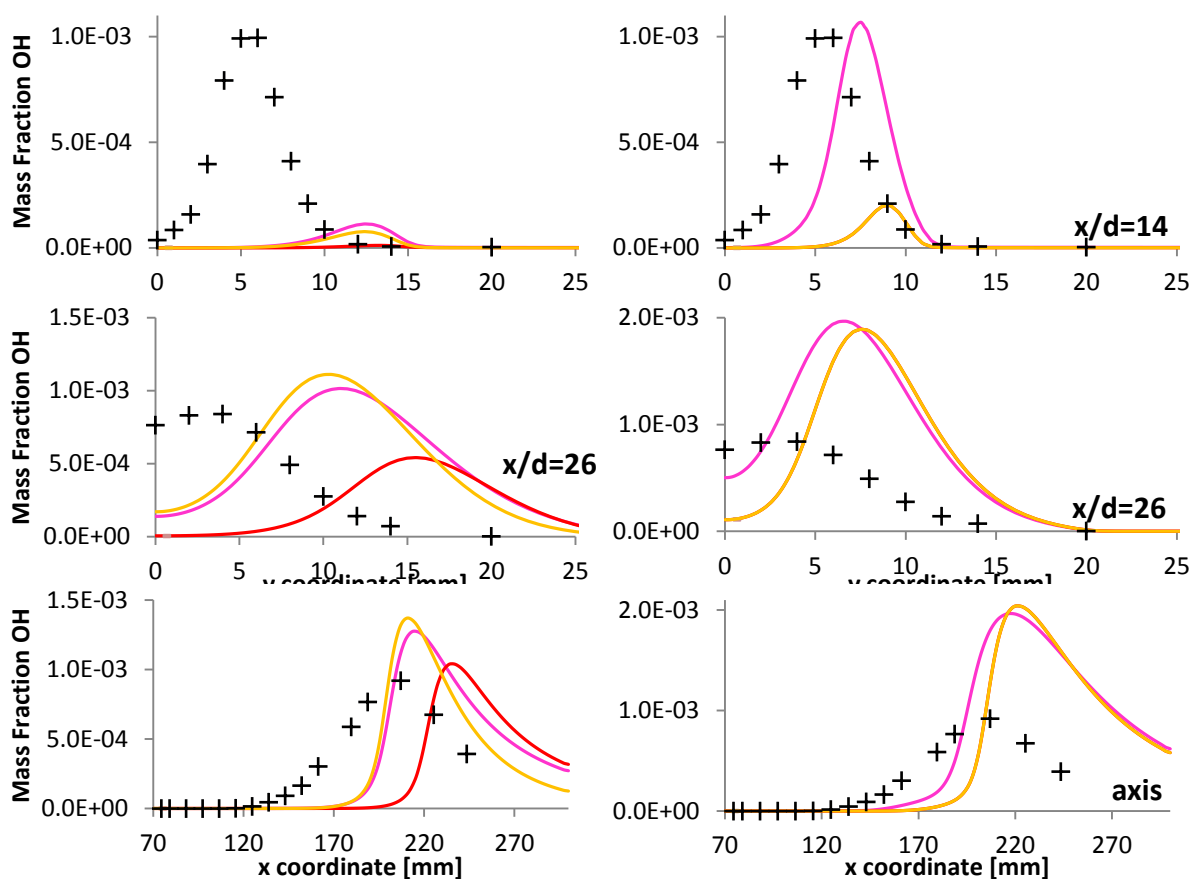


Figura 3.24 Profili frazione massica OH nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza  $k-\varepsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del meccanismo cinetico. I contours di sinistra sono relativi al caso con  $C_{\varepsilon 1}=1.44$ , mentre a destra al caso  $C_{\varepsilon 1}=1.6$ .

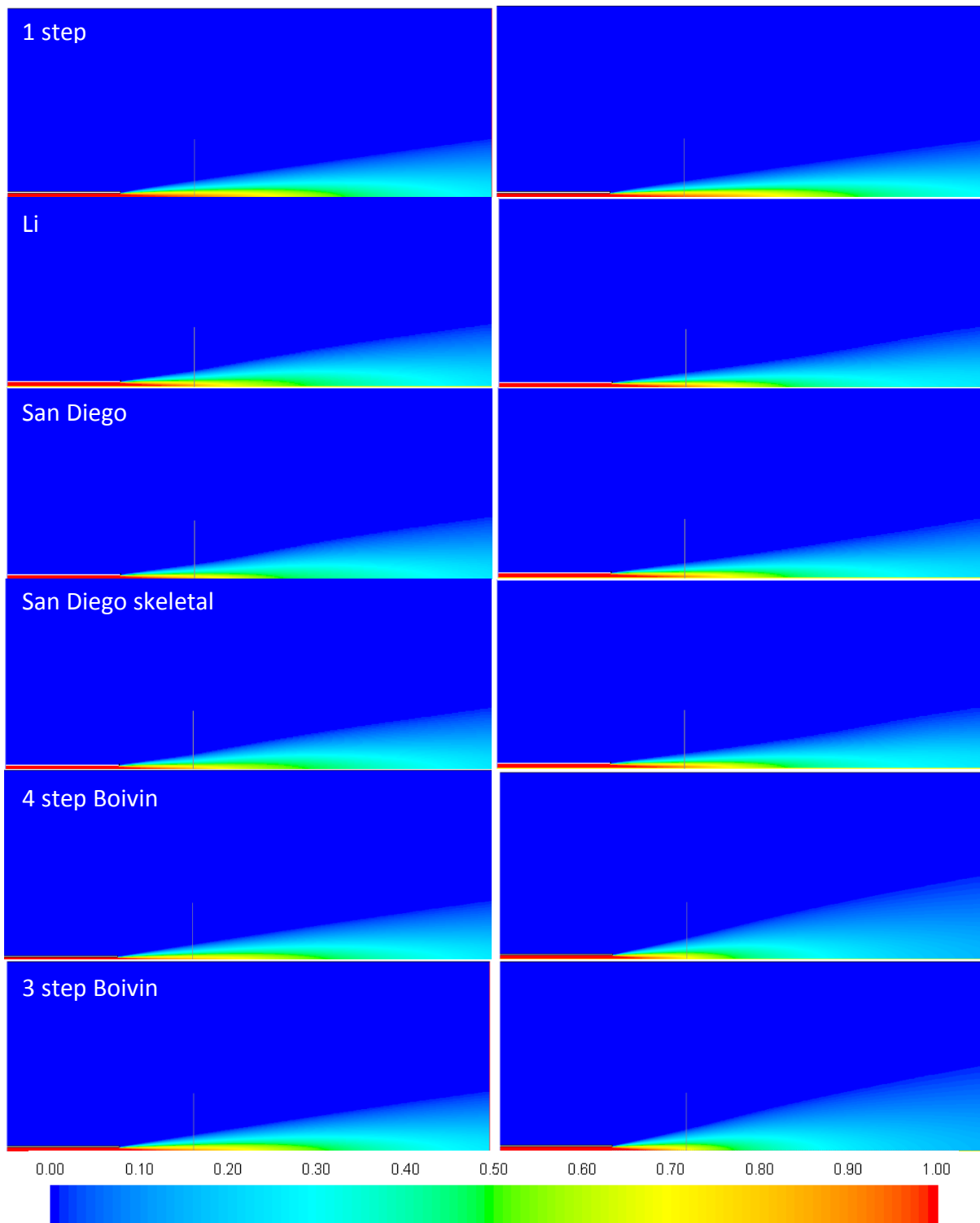
### 3.1.4 Effetto numeri di Schmidt Sct

Dall'analisi della Figura 3.25 si nota una variazione dei contorni della frazione di miscela in seguito all'aumento del valore del numero di Schmidt rispetto al valore di default. Nel caso dello schema cinetico globale la distribuzione appare ancora più assottigliata e raccolta attorno all'asse; mentre nel caso dei meccanismi ridotti a 3 e 4 step secondo Boivin il cono di distribuzione appare più aperto. I meccanismi dettagliati, invece, sembrano non risentire della variazione. I profili radiali di Figura 3.26 confermano la discrepanza degli schemi cinetici ridotti, soprattutto alle maggiori distanze dall'uscita del getto; il profilo assiale evidenzia un andamento sottostimato nel caso degli schemi cinetici ridotti e una sovrastima da parte del meccanismo globale.

Nella successiva Figura 3.27 sono riportati i contorni della temperatura. Il meccanismo globale continua a non fornire una *lifted flame* mentre gli schemi dettagliati sviluppano un'altezza di sollevamento troppo grande tale da non rendere il dominio di calcolo a disposizione adatto alla rappresentazione. In particolare, osservando i profili di temperatura in Figura 3.28 si vede come nel caso degli schemi cinetici dettagliati non abbia luogo l'iniezione della fiamma.



Nelle figure dalla Figura 3.29 alla Figura 3.31 possono essere analizzati i contorni e i profili di due specie minori quali l'H2 e l'OH, che evidenziano la non adeguatezza dei modelli utilizzati.



**Figura 3.25** Contours *mixture fraction* nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza k- $\epsilon$  standard con  $C_{\epsilon 1}=1.6$  al variare del meccanismo cinetico. I contours di sinistra sono relativi al caso con  $Sc_t = 0.7$ , mentre a destra al caso  $Sc_t = 0.9$

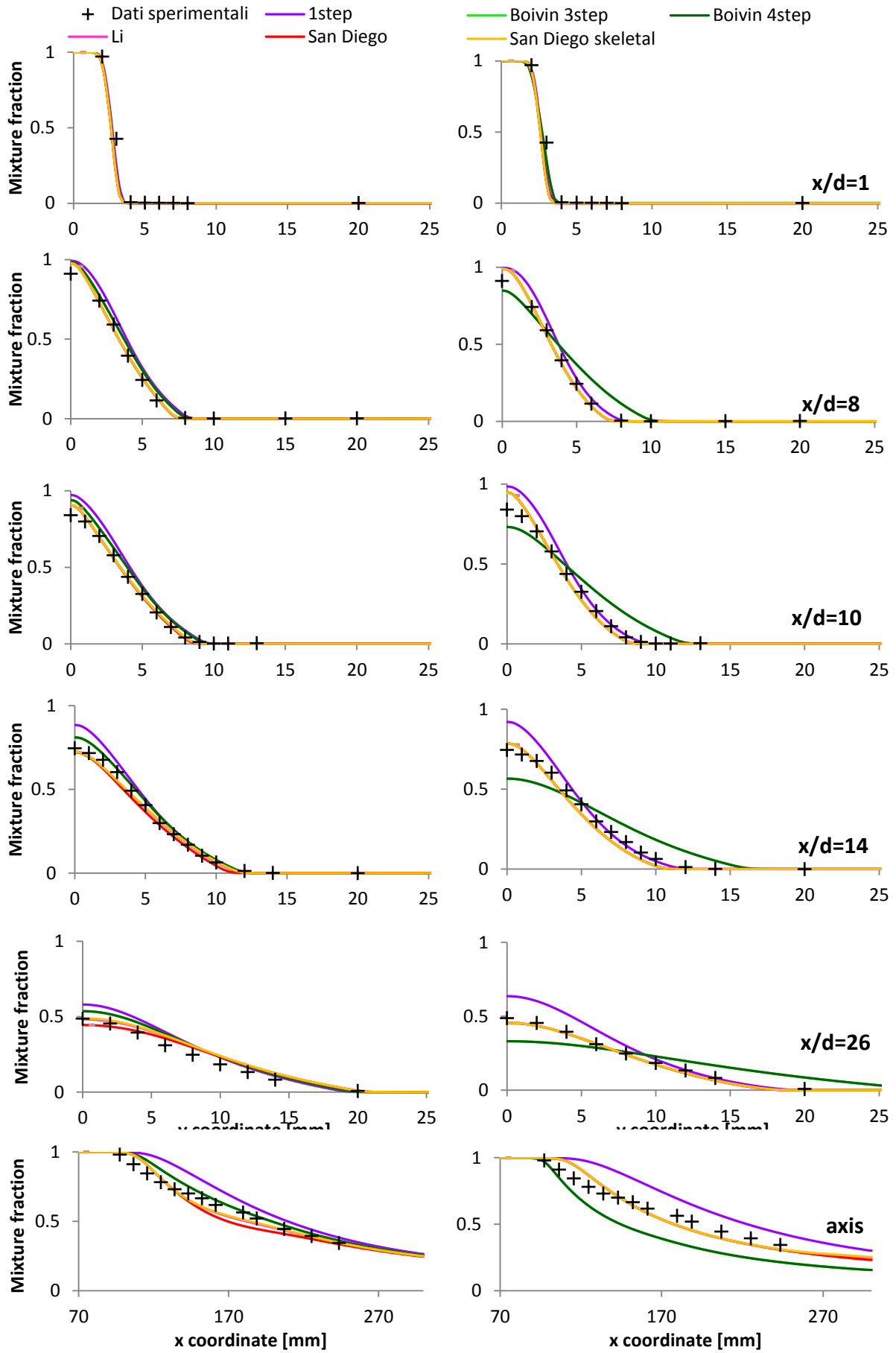
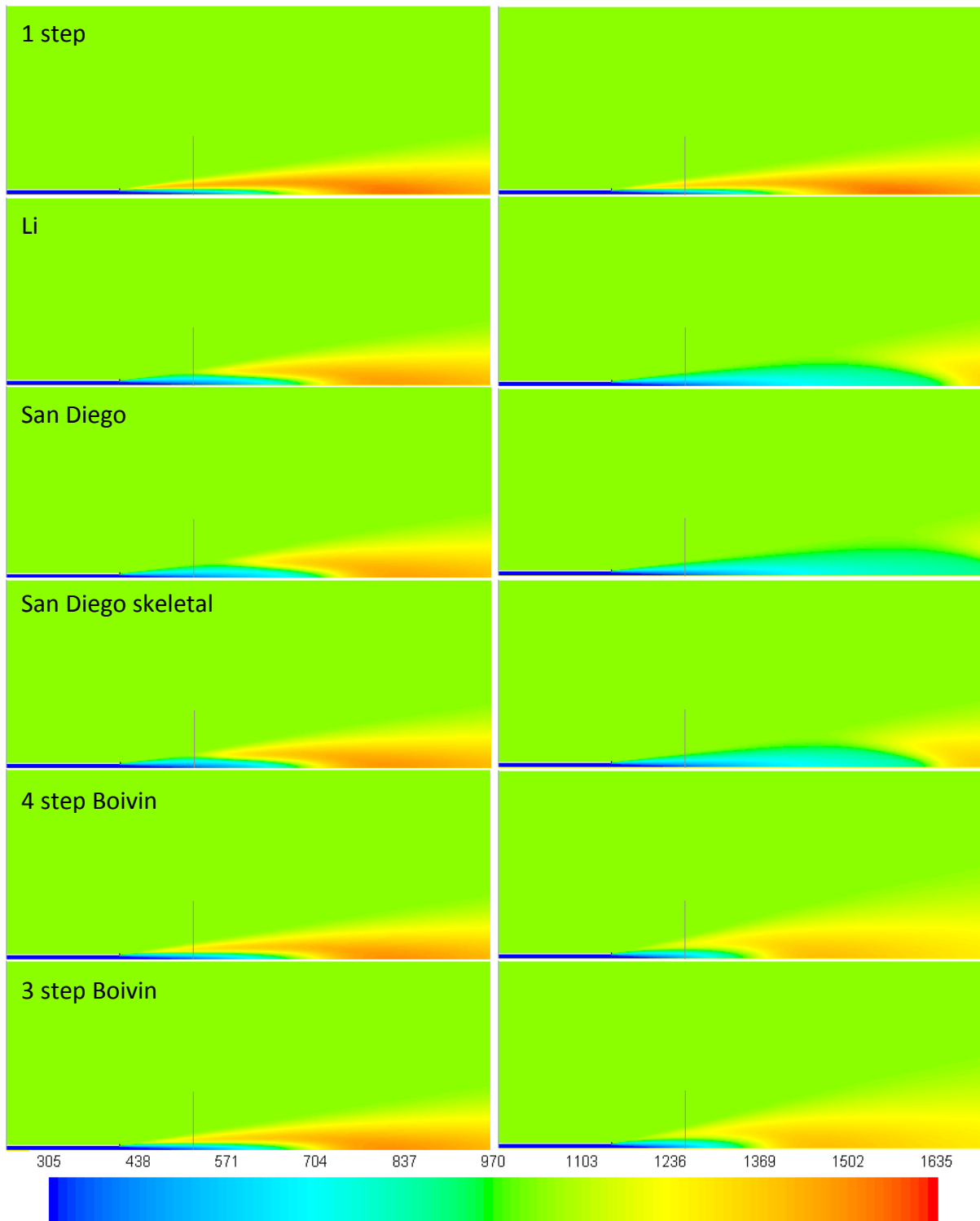


Figura 3.26 Profili *mixture fraction* nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza  $k-\varepsilon$  standard con  $C_{\varepsilon 1}=1.6$  al variare del meccanismo cinetico. I contours di sinistra sono relativi al caso con  $Sc_t = 0.7$ , mentre a destra al caso  $Sc_t = 0.9$



**Figura 3.27** Contours temperatura nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza  $k-\varepsilon$  standard con  $C_{\varepsilon 1}=1.6$  al variare del meccanismo cinetico. I contours di sinistra sono relativi al caso con  $Sc_t = 0.7$ , mentre a destra al caso  $Sc_t = 0.9$

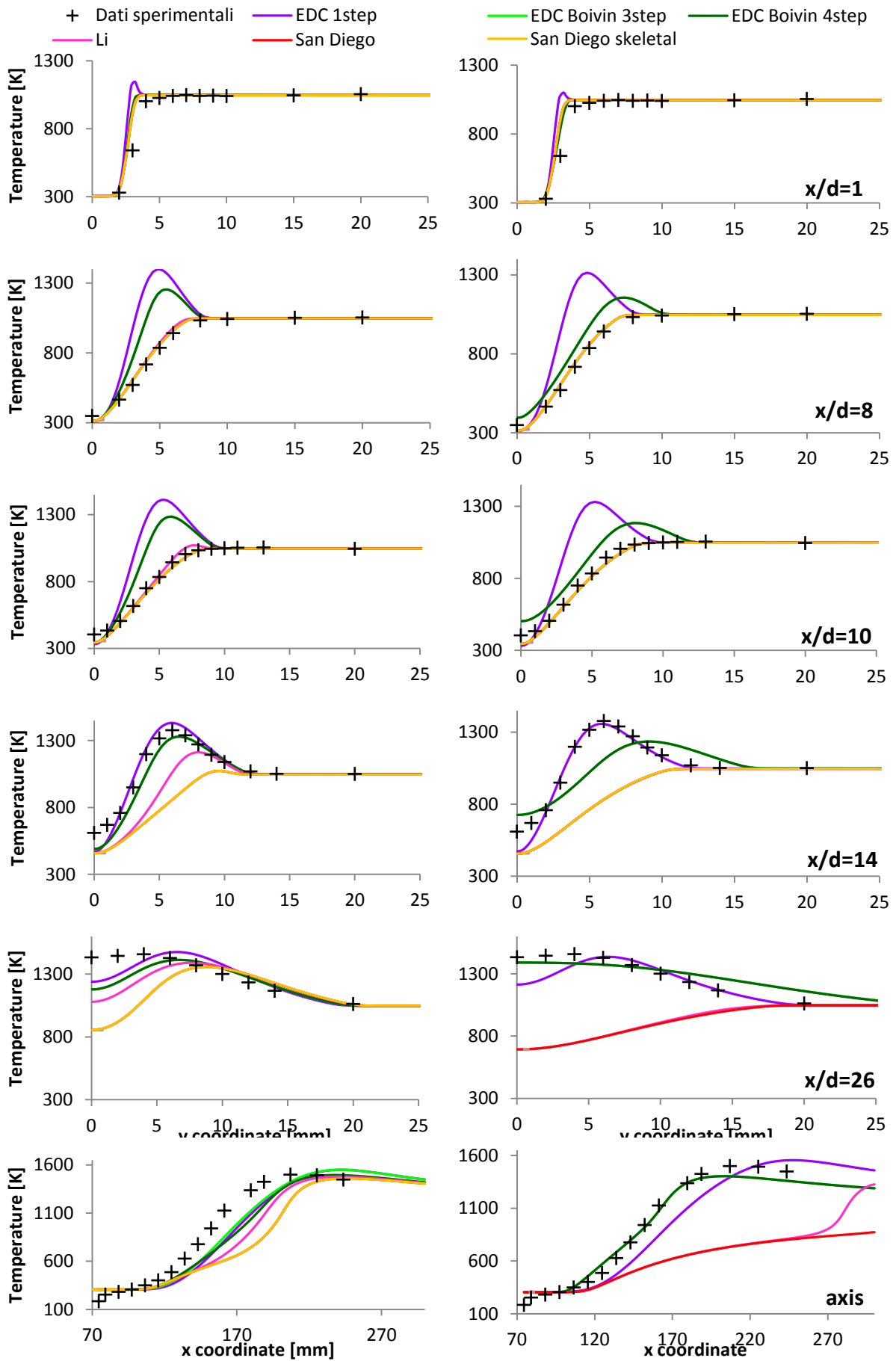
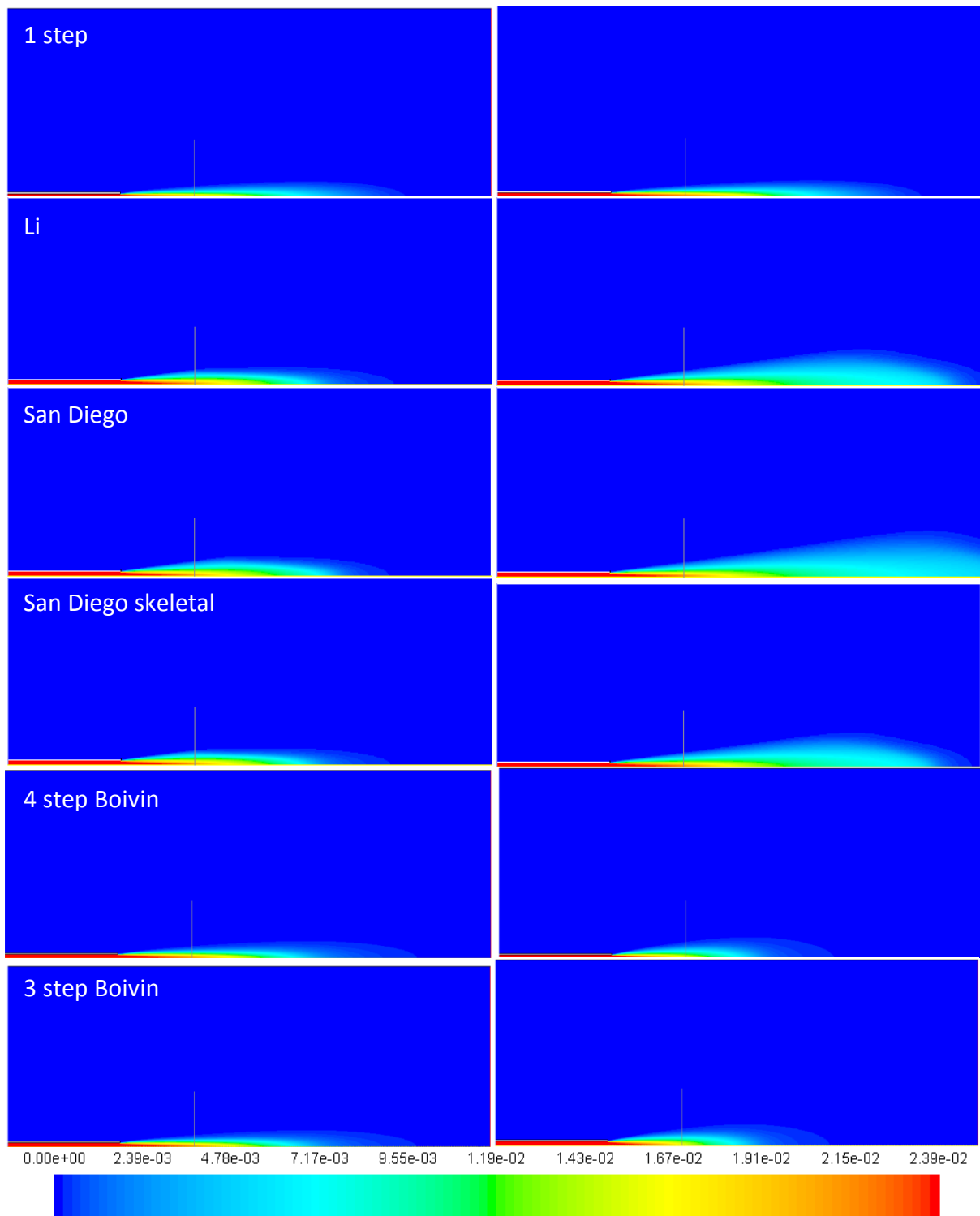


Figura 3.28 Contours temperatura nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza  $k-\varepsilon$  standard con  $C_{\varepsilon 1}=1.6$  al variare del meccanismo cinetico. I contours di sinistra sono relativi al caso con  $Sc_t = 0.7$ , mentre a destra al caso  $Sc_t = 0.9$



**Figura 3.29** Contours frazione massica  $H_2$  nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza  $k-\varepsilon$  standard con  $C_{\varepsilon 1}=1.6$  al variare del meccanismo cinetico. I contours di sinistra sono relativi al caso con  $Sc_t = 0.7$ , mentre a destra al caso  $Sc_t = 0.9$

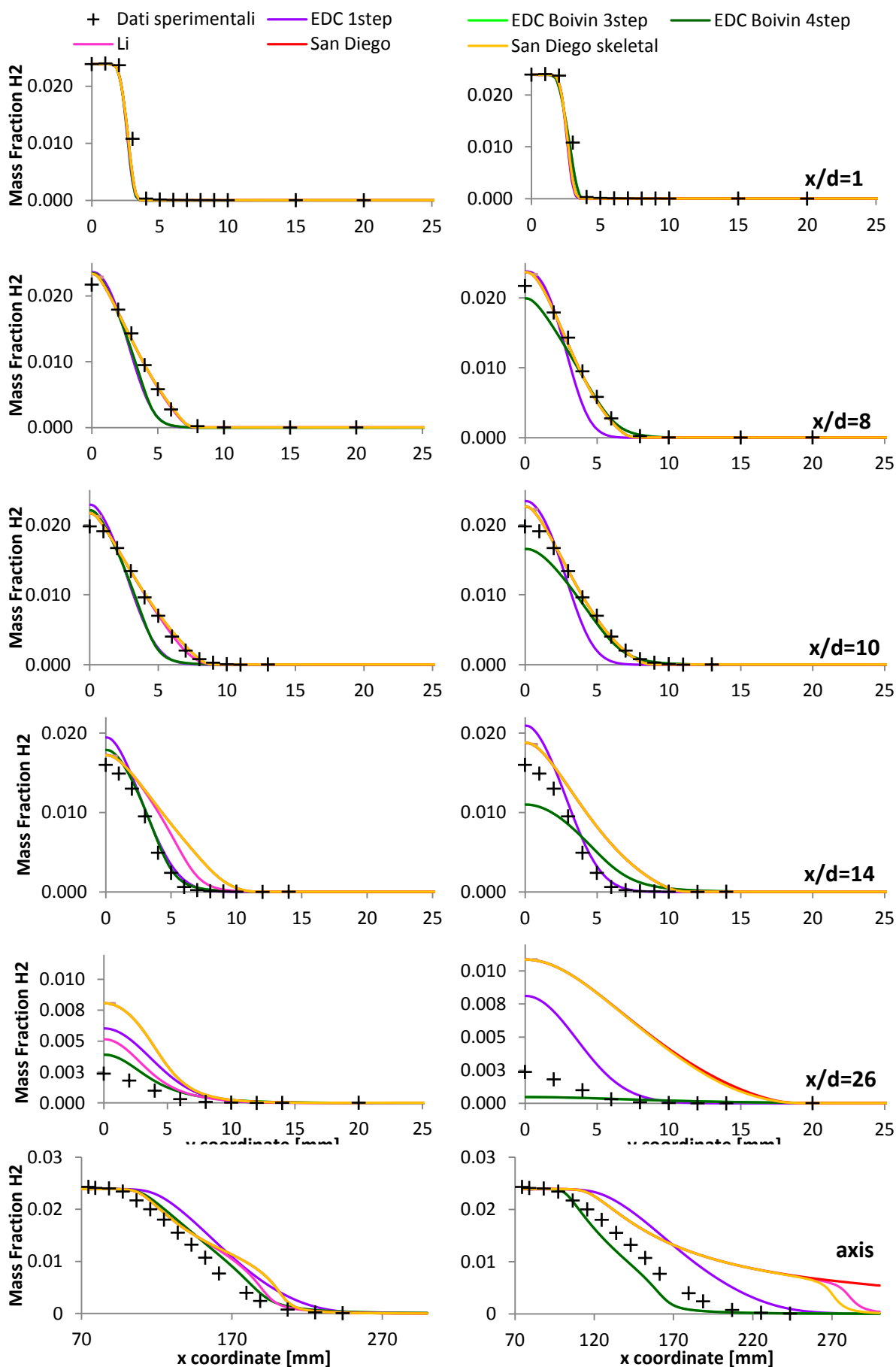
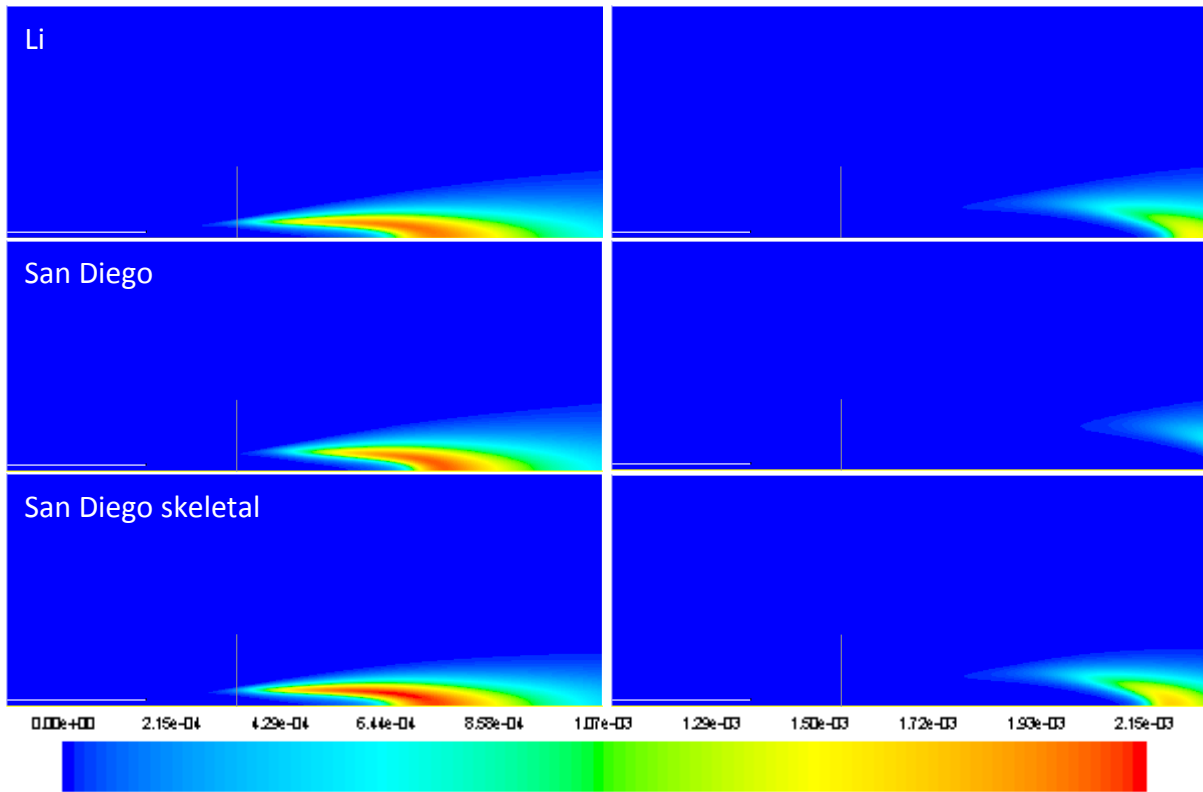
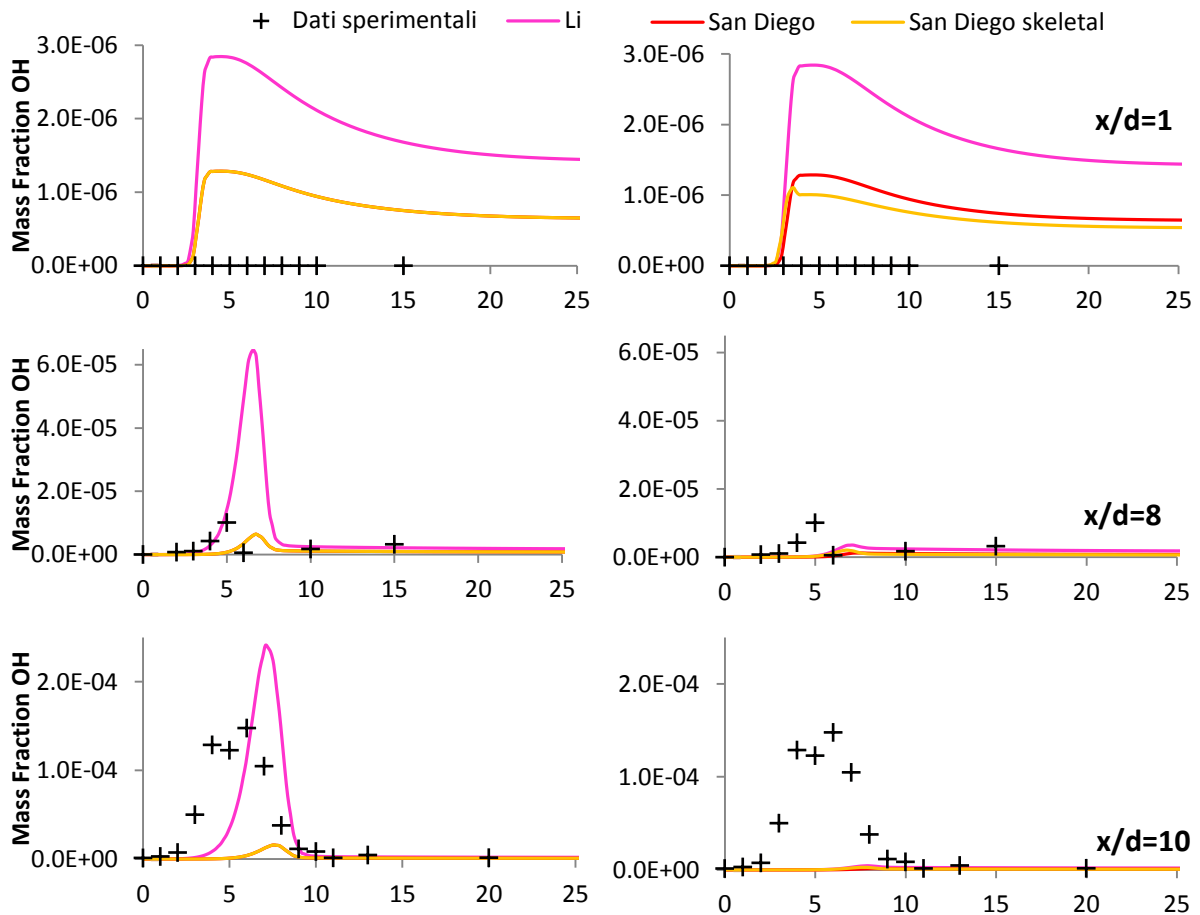


Figura 3.30 Profili frazione massa H<sub>2</sub> nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza  $k-\varepsilon$  standard con  $C_{\varepsilon 1}=1.6$  al variare del meccanismo cinetico. I contours di sinistra sono relativi al caso con  $Sc_t = 0.7$ , mentre a destra al caso  $Sc_t = 0.9$



**Figura 3.31** Contours frazione massica OH nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza  $k-\varepsilon$  standard e  $Sc_t = 0.7$  al variare del meccanismo cinetico. I contours di sinistra sono relativi al caso con  $C_{\varepsilon 1}=1.44$ , mentre a destra al caso  $C_{\varepsilon 1}=1.6$ .



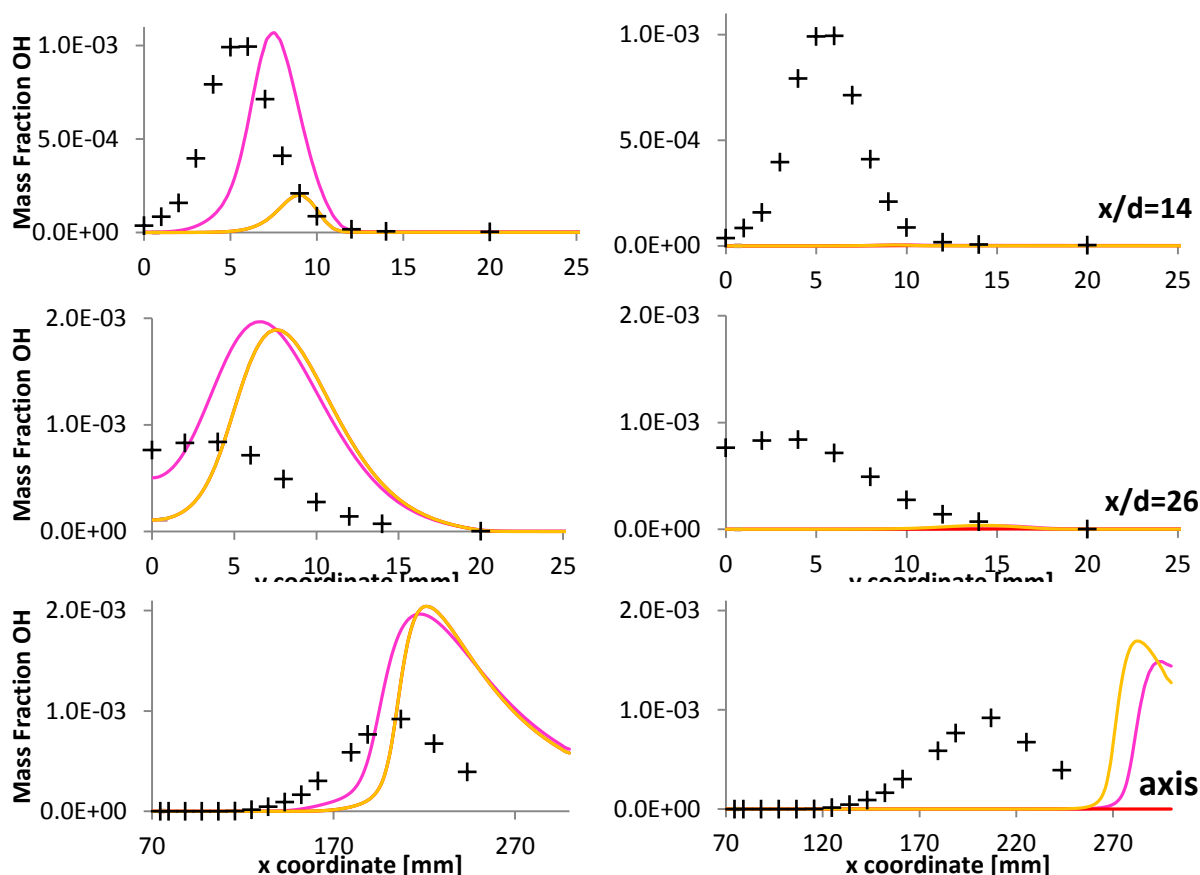


Figura 3.32 Profili frazione massica OH nel caso di modello di interazione EDC, modello di turbolenza  $k-\varepsilon$  standard con  $C_{\varepsilon 1}=1.6$  al variare del meccanismo cinetico. I contours di sinistra sono relativi al caso con  $Sc_t = 0.7$ , mentre a destra al caso  $Sc_t = 0.9$

### 3.1.5 Effetto modello di turbolenza

A questo punto è stata valutata l'influenza del modello di turbolenza utilizzando il modello  $k-\varepsilon$  RNG al fine di ottenere una migliore predizione in quanto tiene conto anche degli effetti a bassi numeri di Reynolds.

Il confronto è stato, fatto a parità di schema cinetico San Diego con modello di interazione cinetica-turbolenza Eddy Dissipation Concept, nei due casi di  $Sc_t=0.7$  e  $Sc_t=0.9$  visti precedentemente.

Nel primo caso di  $Sc_t=0.7$  il nuovo modello di turbolenza non produce modifiche apprezzabili per quanto riguarda la distribuzione della mixture fraction e i suoi profili radiali e assiale; mentre nel caso con  $Sc_t=0.9$  si nota una lieve apertura del cono di distribuzione (Figura 3.33) e quindi un distacco dei profili radiali lontani dal bordo del getto e di quello assiale (Figura 3.34).

Osservando i contorni della temperatura (Figura 3.35) si vede come l'altezza di sollevamento sia eccessivamente elevata in tutti e quattro i casi portando a profili radiali e assiale che si discostano dai valori misurati (Figura 3.36).

Successivamente si riportano per completezza i contorni (Figura 3.37 e Figura 3.39) e i profili (Figura 3.38 e Figura 3.40) delle specie minori quali  $H_2$  e  $OH$  che nel caso di numero di Schmidt pari a 0.9 seguono molto bene i valori misurati ma poi si distaccano da essi.



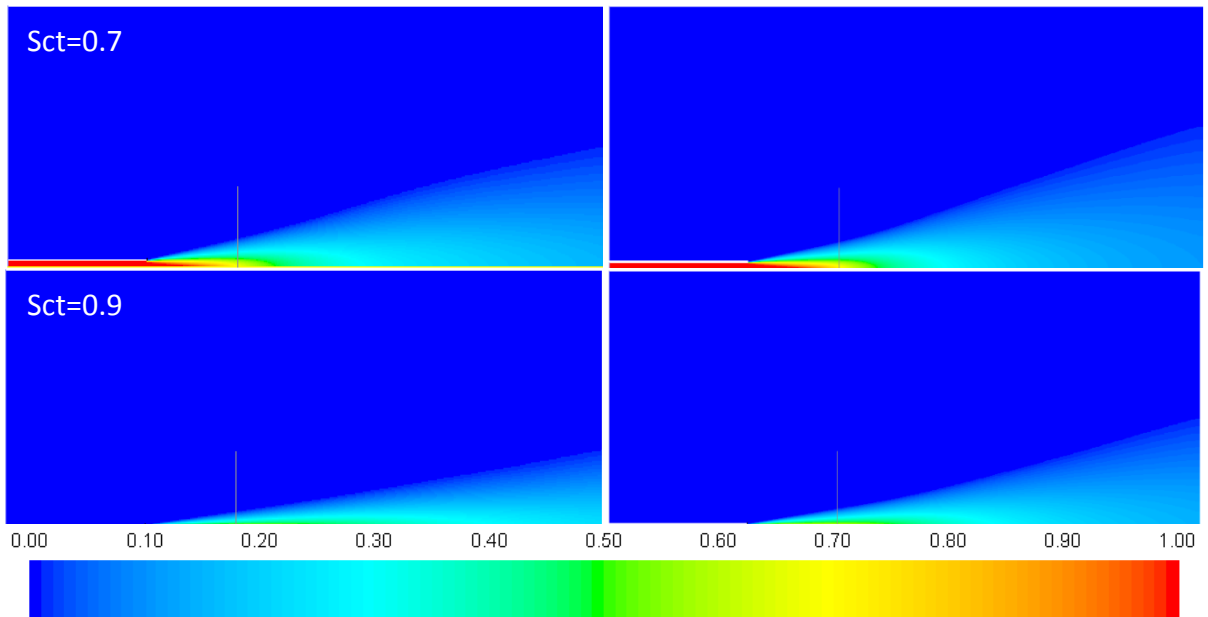


Figura 3.33 Contours mixture fraction al variare del modello di turbolenza. A sinistra k- $\epsilon$  standard e a destra k- $\epsilon$  RNG

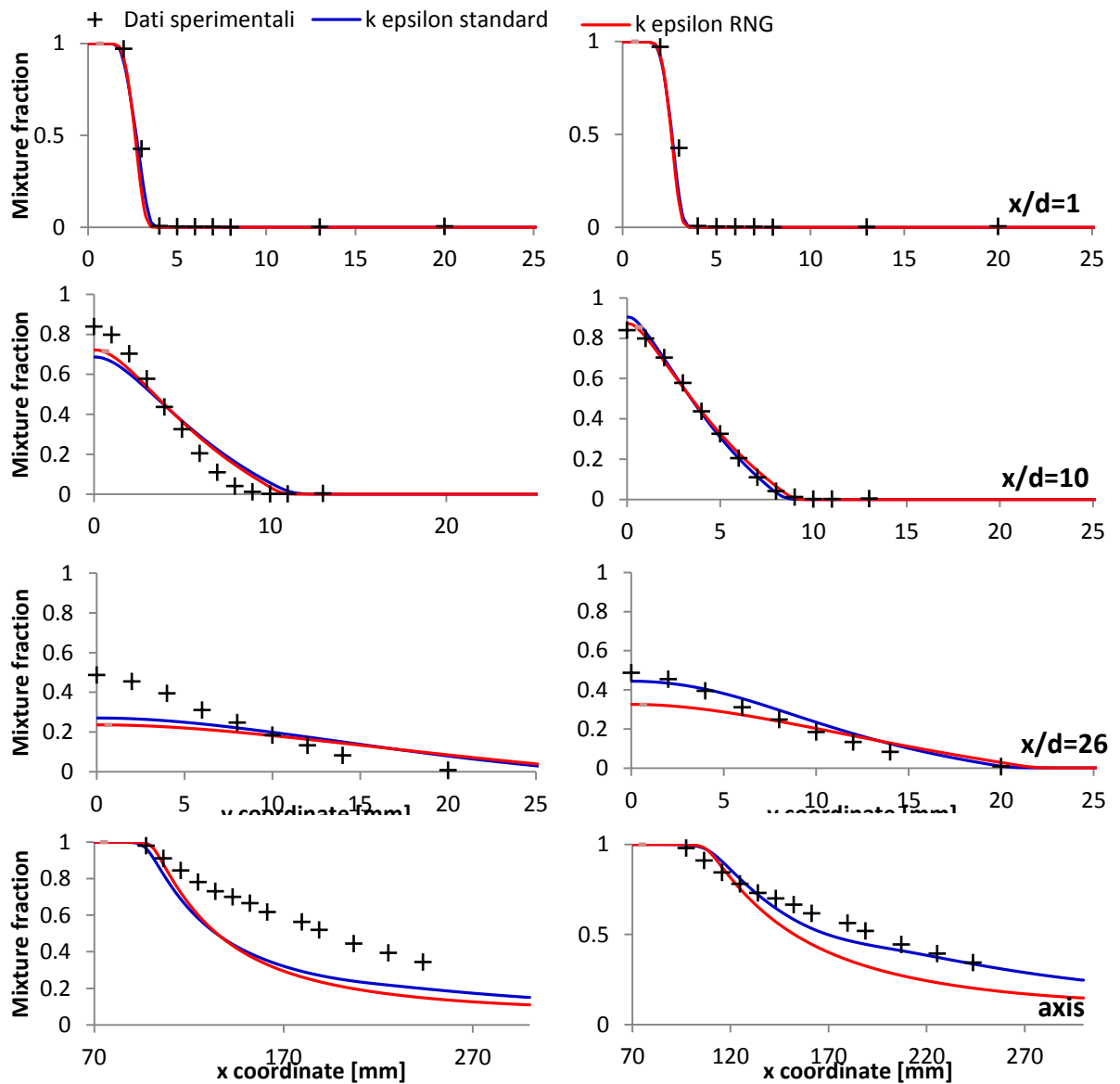


Figura 3.34 Profili *mixture fraction* al variare del modello di turbolenza. A sinistra Sct=0.7 e a destra Sct=0.9.

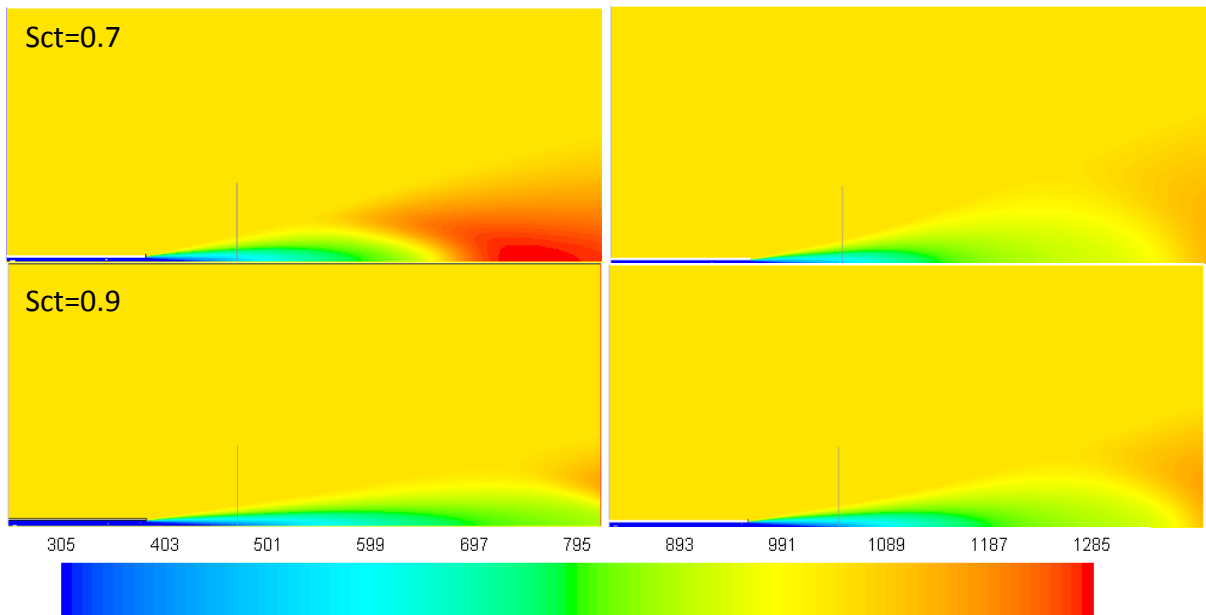


Figura 3.35 Contours temperatura al variare del modello di turbolenza. A sinistra  $k-\epsilon$  standard e a destra  $k-\epsilon$  RNG

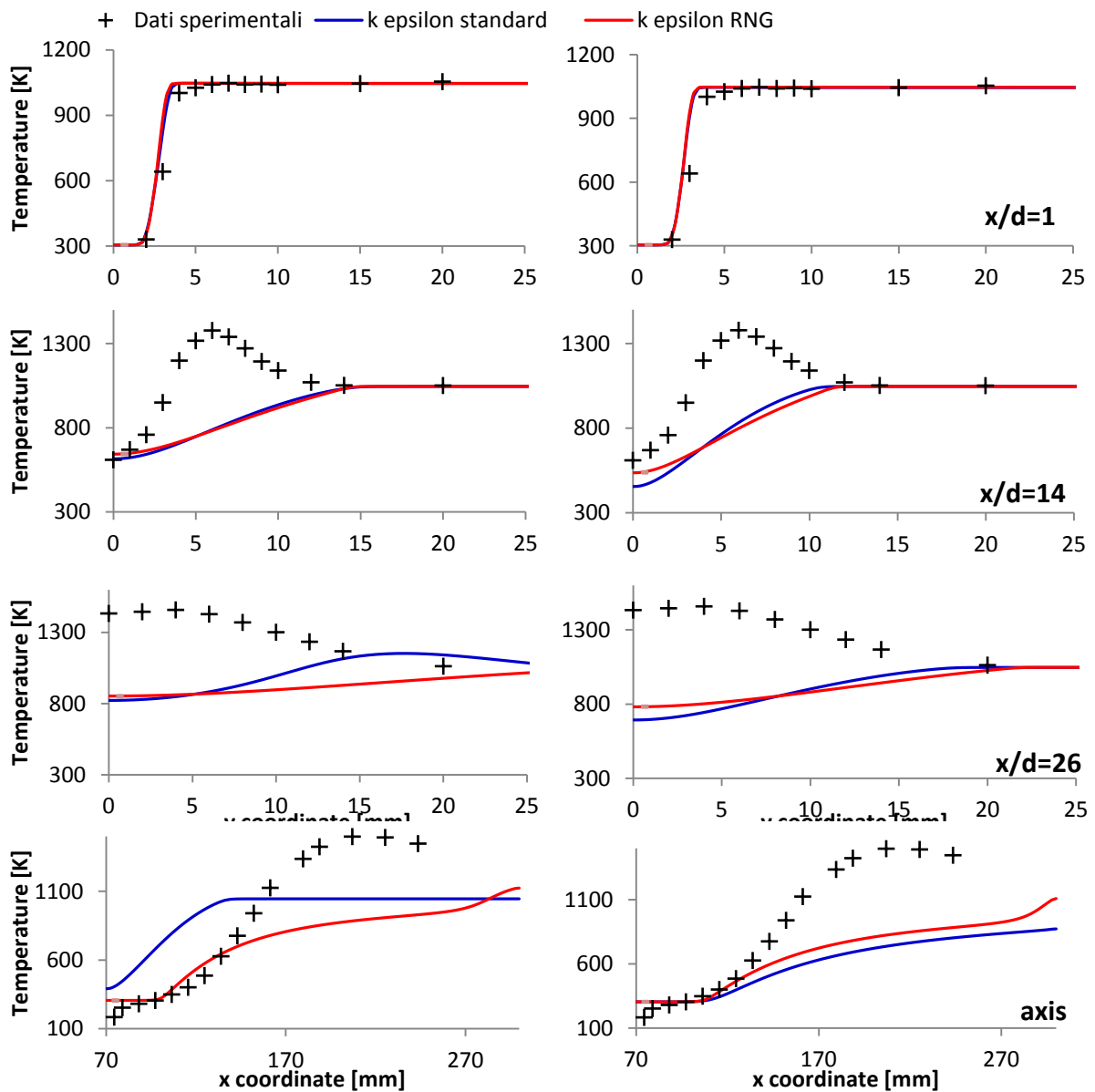


Figura 3.36 Profili temperatura al variare del modello di turbolenza. A sinistra  $S_{ct}=0.7$  e a destra  $S_{ct}=0.9$ .

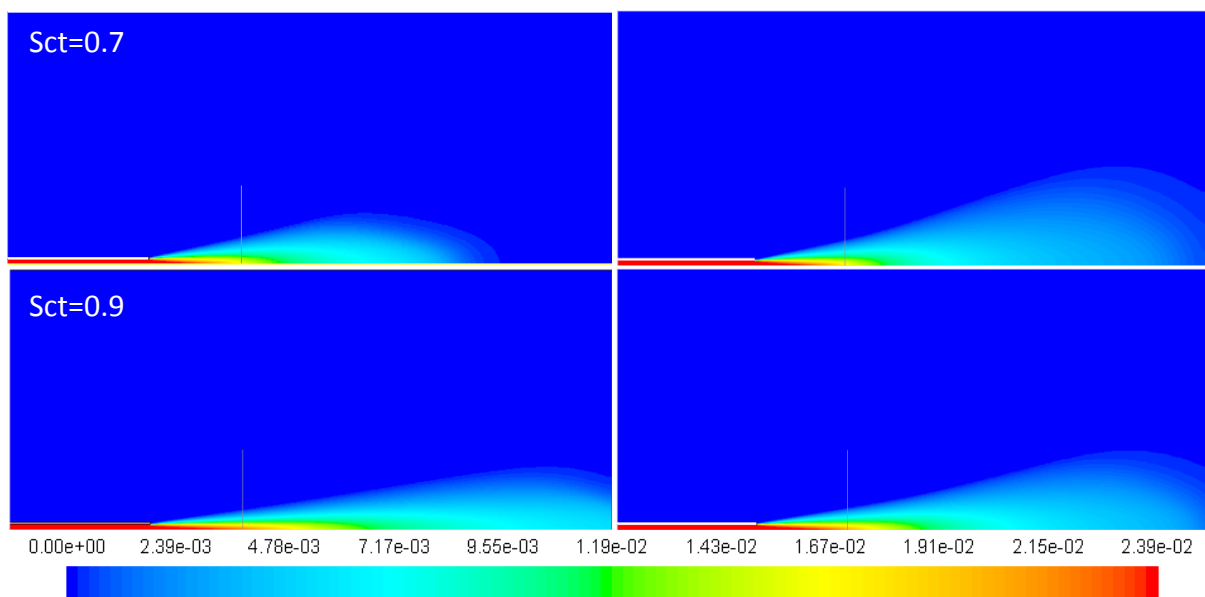


Figura 3.37 Contours frazione massica  $H_2$  al variare del modello di turbolenza. A sinistra  $k-\epsilon$  standard e a destra  $k-\epsilon$  RNG

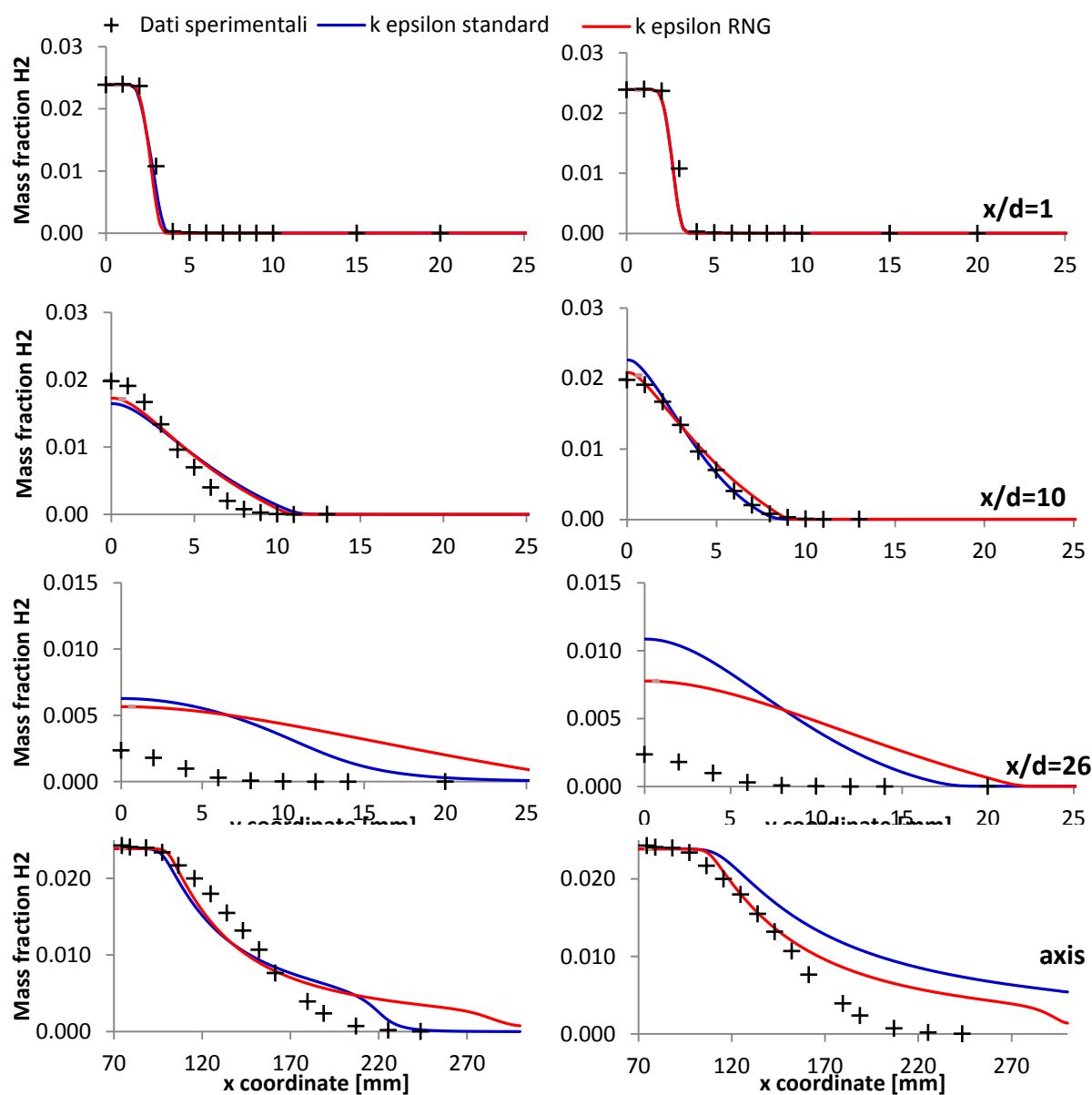


Figura 3.38 Profili frazione massica  $H_2$  al variare del modello di turbolenza. A sinistra  $Sct=0.7$  e a destra  $Sct=0.9$ .

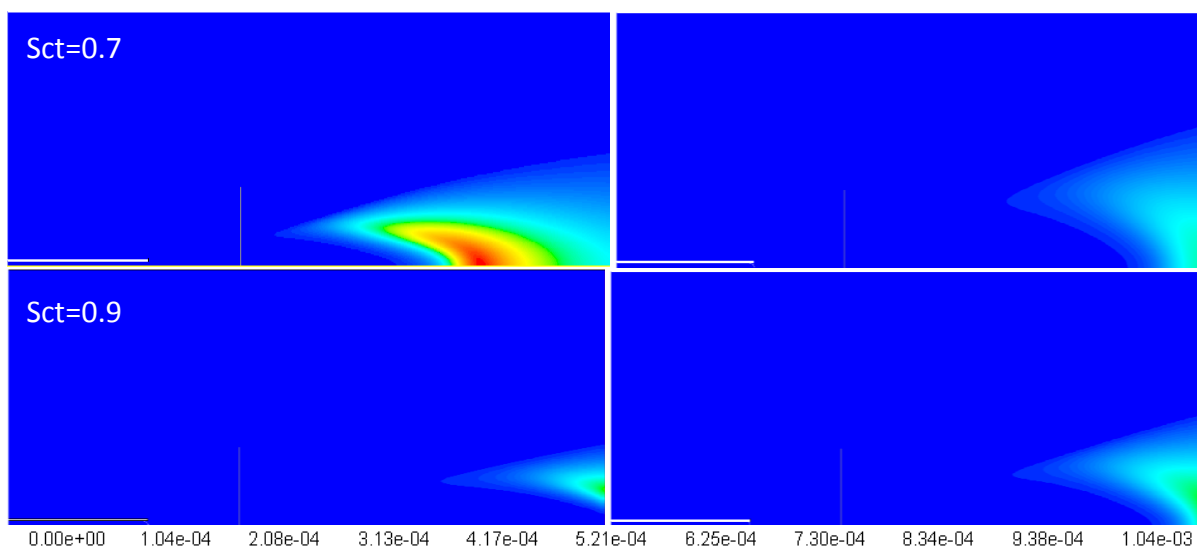


Figura 3.39 Contours frazione massica OH al variare del modello di turbolenza. A sinistra k- $\epsilon$  standard e a destra k- $\epsilon$  RNG

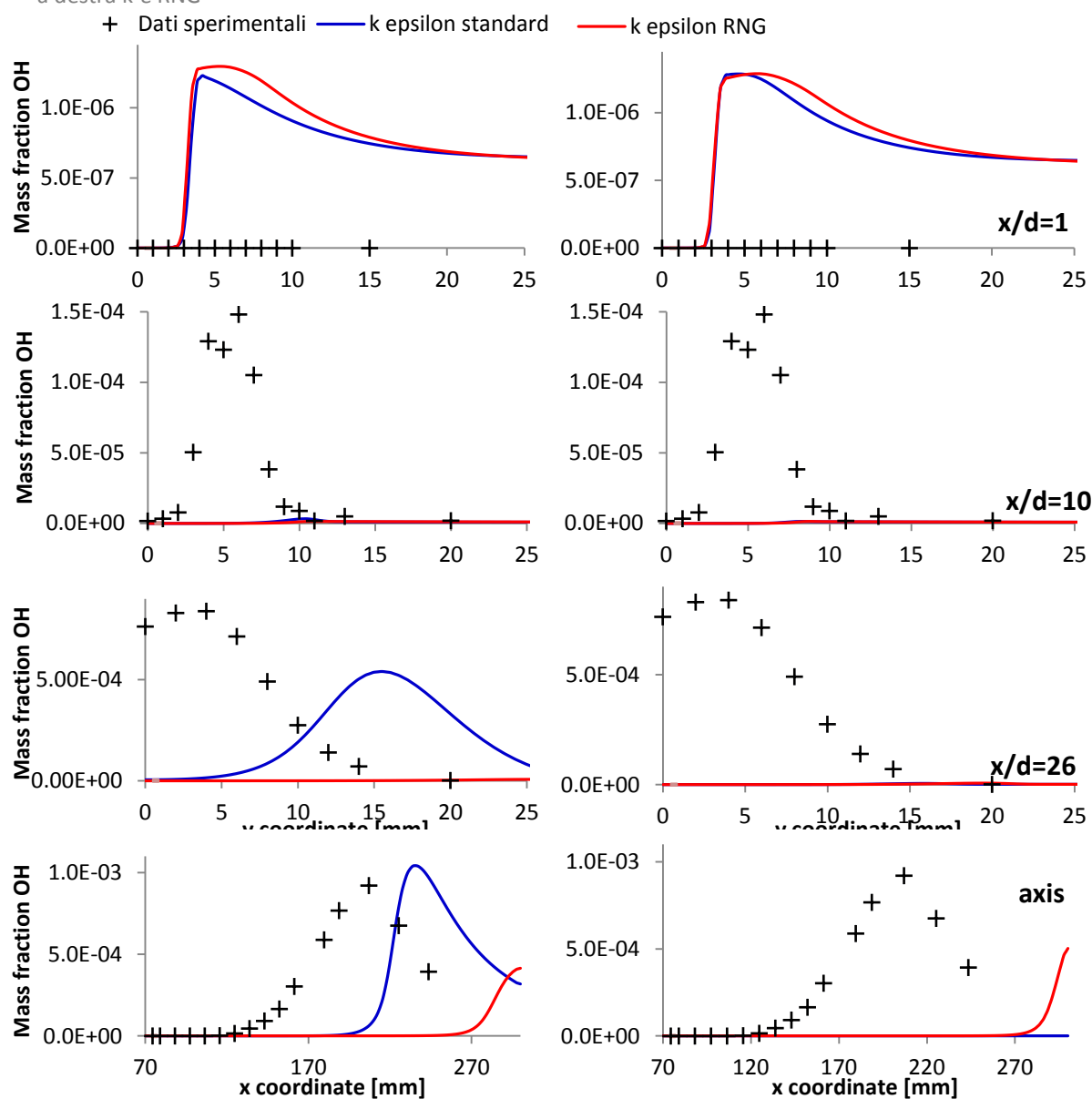


Figura 3.40 Profili frazione massica OH al variare del modello di turbolenza. A sinistra  $Scv=0.7$  e a destra  $Scv=0.9$ .

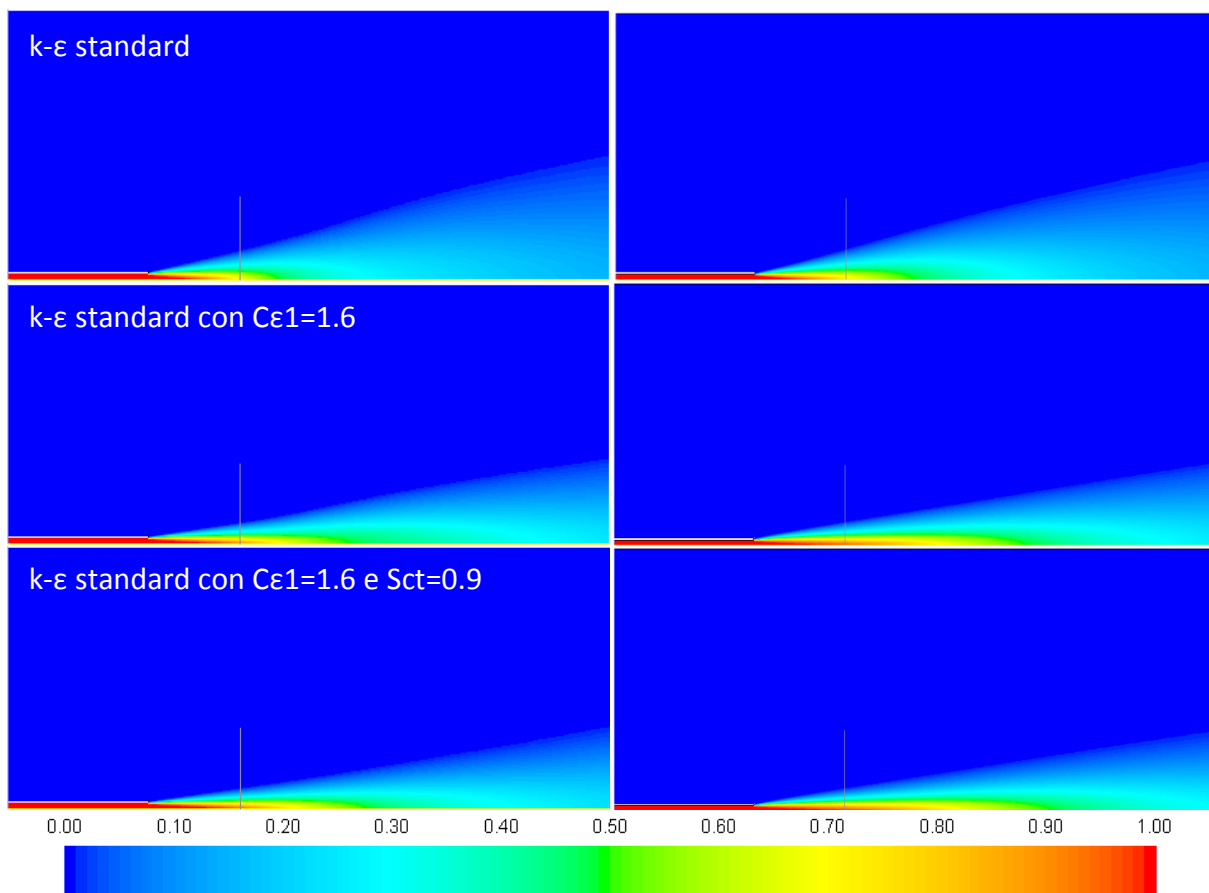
### 3.1.6 Effetto Multicomponent Diffusion

La Figura 3.41 e Figura 3.42 mostrano l'effetto della diffusione molecolare nelle predizioni della frazione di miscela, evidenziando un contributo non trascurabile. Generalmente la diffusione molecolare viene trascurata in quanto molto minore di quella turbolenta: tuttavia vi sono condizioni per le quali la diffusività molecolare può essere importante, come nel caso di specie chimiche altamente diffusive (ad es. idrogeno).

Mentre il modello  $k-\epsilon$  standard continua a dare una previsione di gran lunga distante dai valori misurati, negli altri due casi i profili radiali sono molto aderenti a quelli sperimentali nelle zone più lontane dall'asse, il profilo assiale invece è sovrastimato e risulta peggiore rispetto al caso in assenza di diffusione multicomponente.

Per quanto riguarda le temperature, i cui profili sono riportati in Figura 3.43, le variazioni sono molto più evidenti e la fiamma risulta meno sollevata. Dall'osservazione dei profili in Figura 3.44 si nota però che l'altezza di sollevamento sia troppo bassa avendosi ignizione a una distanza radiale inferiore ai 10d.

I contorni della specie minore  $H_2$  (Figura 3.45) e del radicale  $OH$  (Figura 3.47) appaiono anch'essi molto variati e lo confermano anche i relativi profili in Figura 3.46 e Figura 3.48.



**Figura 3.41** Contours *mixture fraction* senza (a sinistra) e con (a destra) l'opzione *Full Multicomponent Diffusion* per il trasporto delle specie

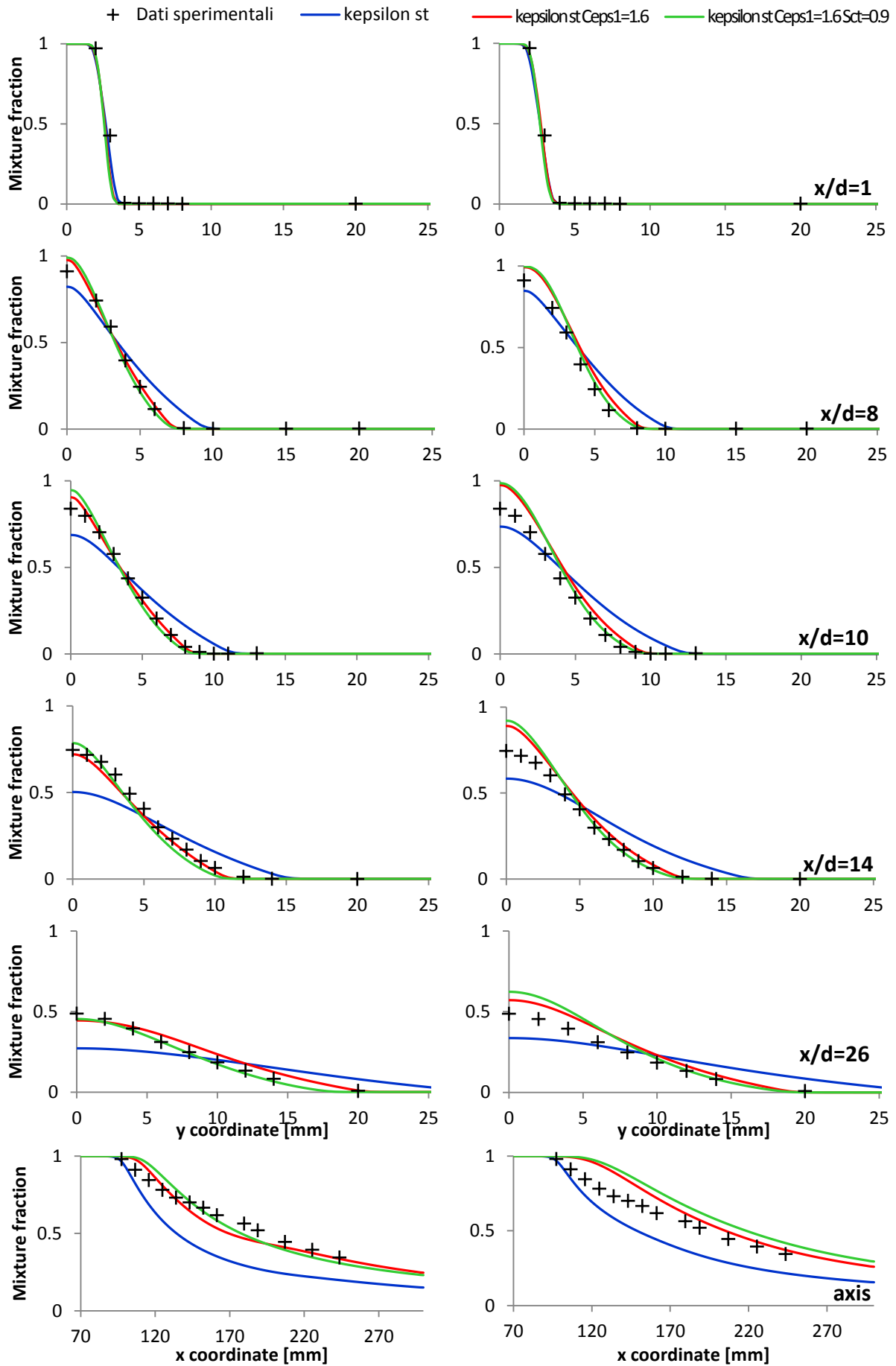
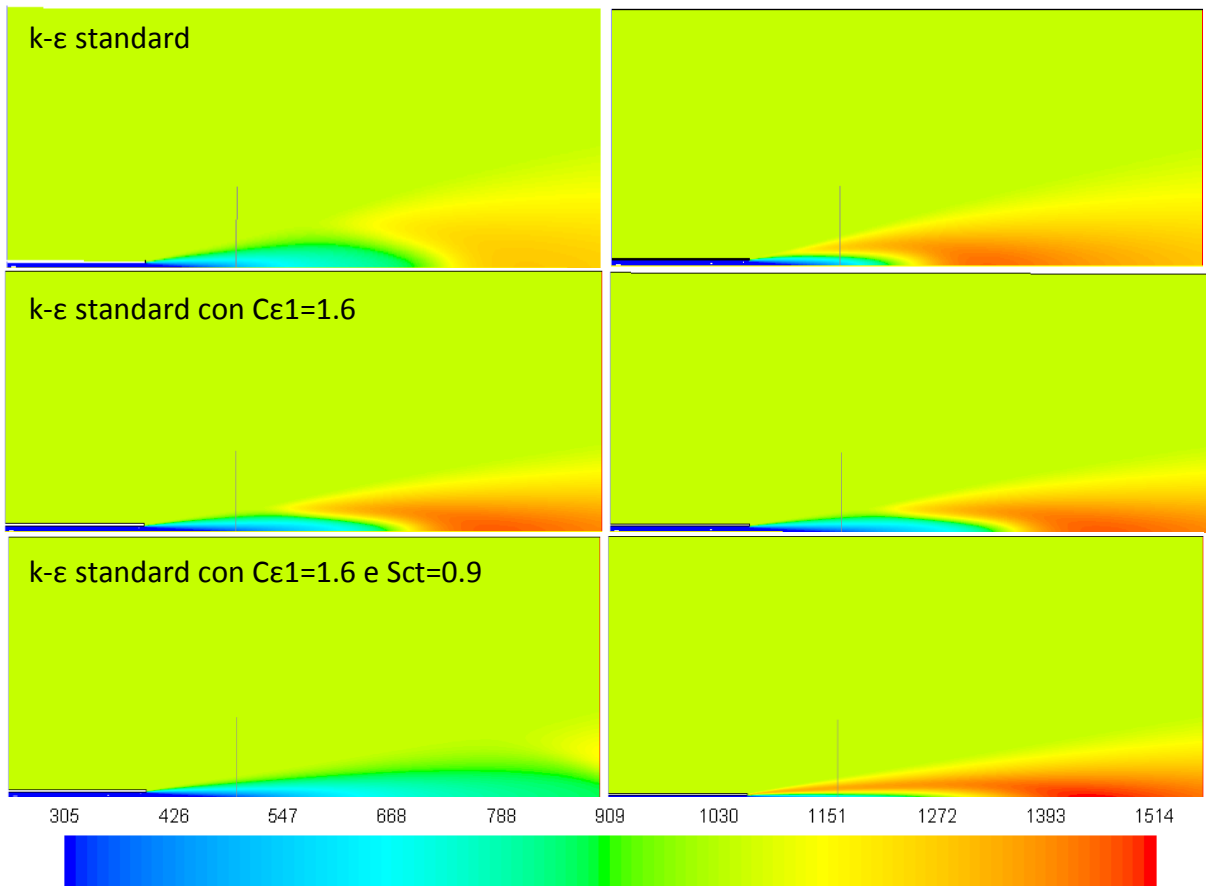
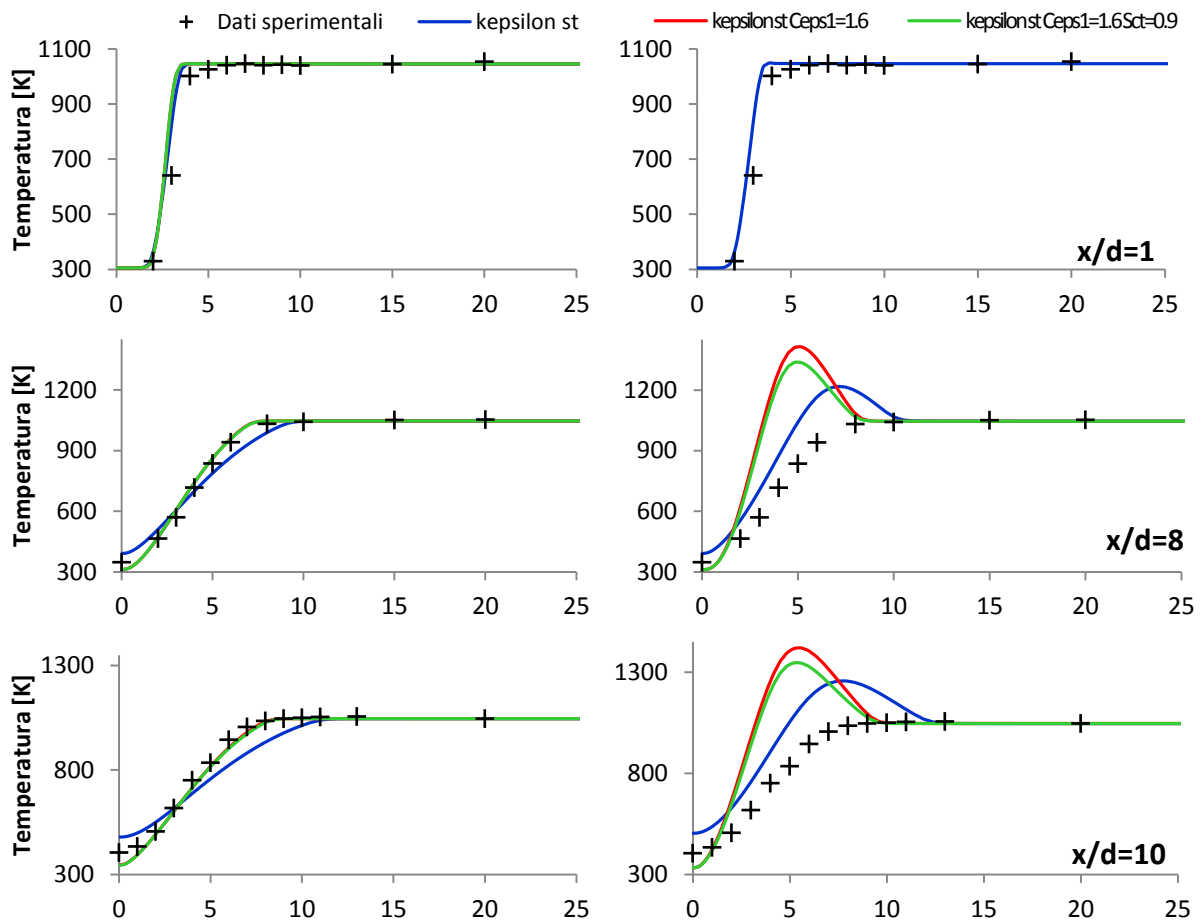


Figura 3.42 Profili *mixture fraction* senza (a sinistra) e con (a destra) l'opzione *Full Multicomponent Diffusion* per il trasporto delle specie



**Figura 3.43** Contours temperatura senza (a sinistra) e con (a destra) l'opzione *Full Multicomponent Diffusion* per il trasporto delle specie



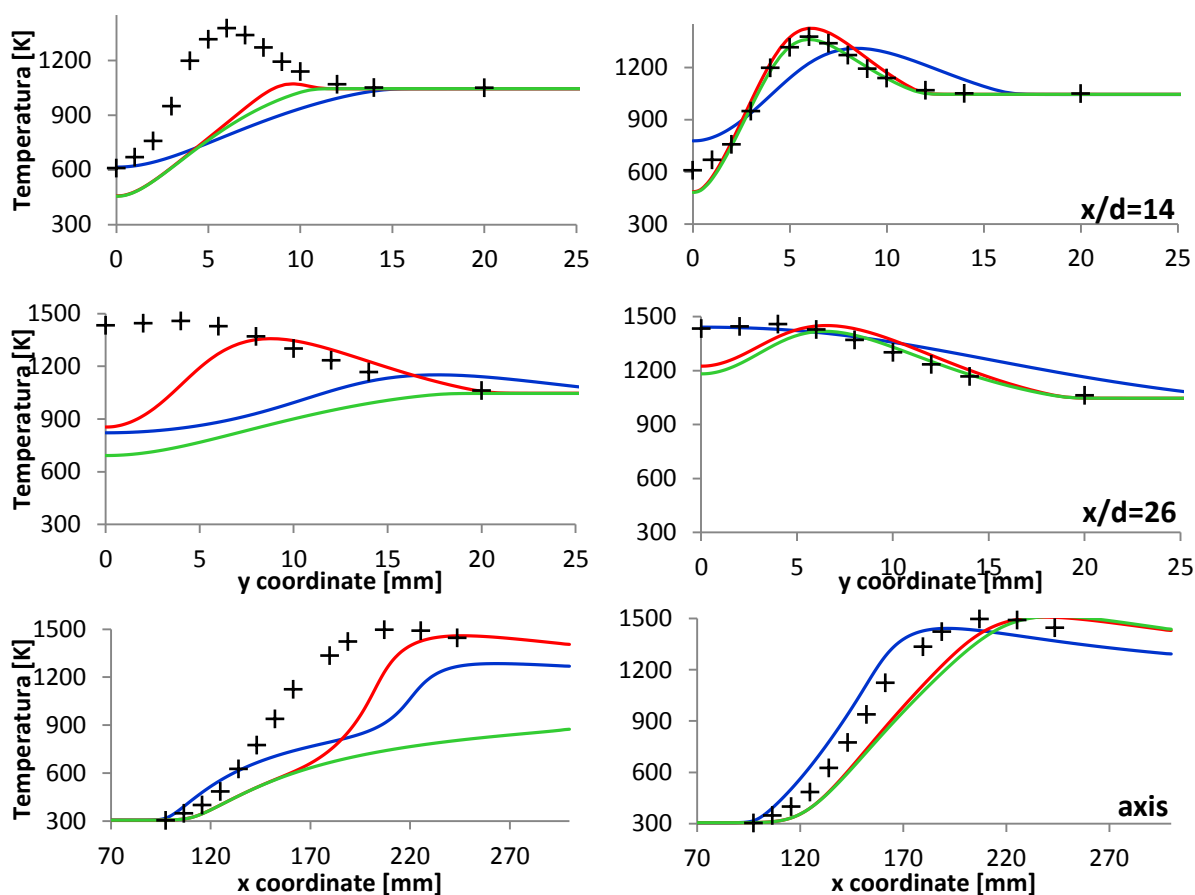


Figura 3.44 Profili temperatura senza (a sinistra) e con (a destra) l'opzione *Full Multicomponent Diffusion* per il trasporto delle specie

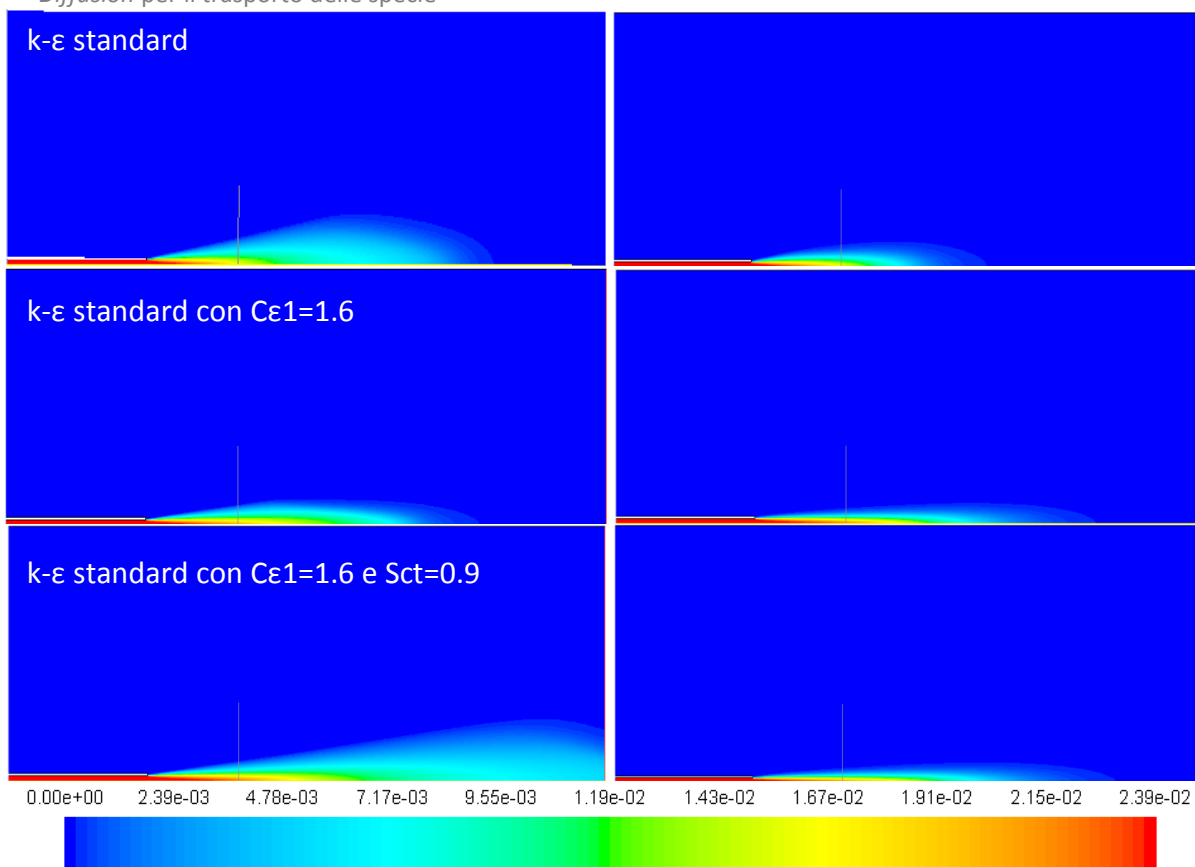


Figura 3.45 Contours frazione massica  $H_2$  senza (a sinistra) e con (a destra) l'opzione *Full Multicomponent Diffusion* per il trasporto delle specie



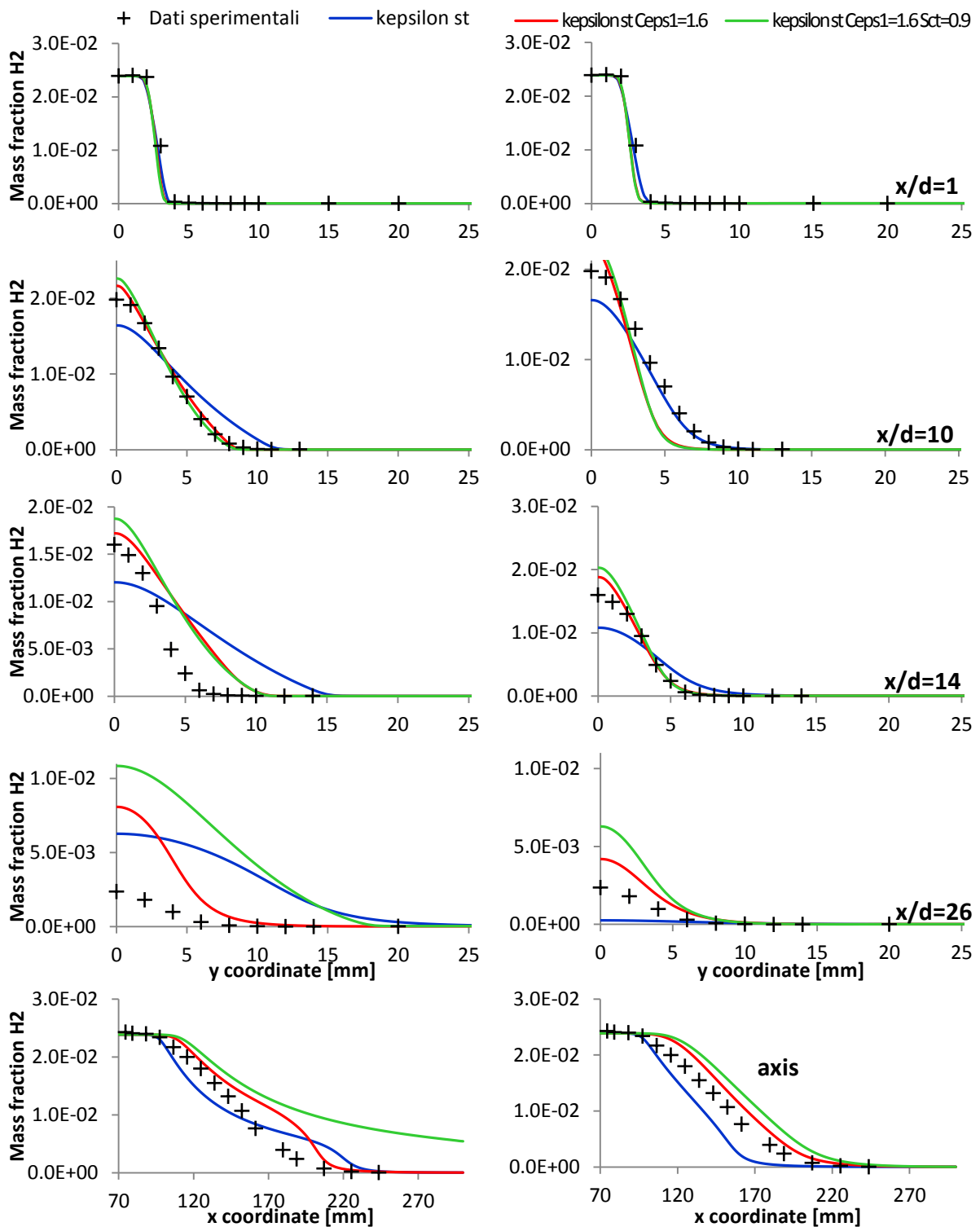
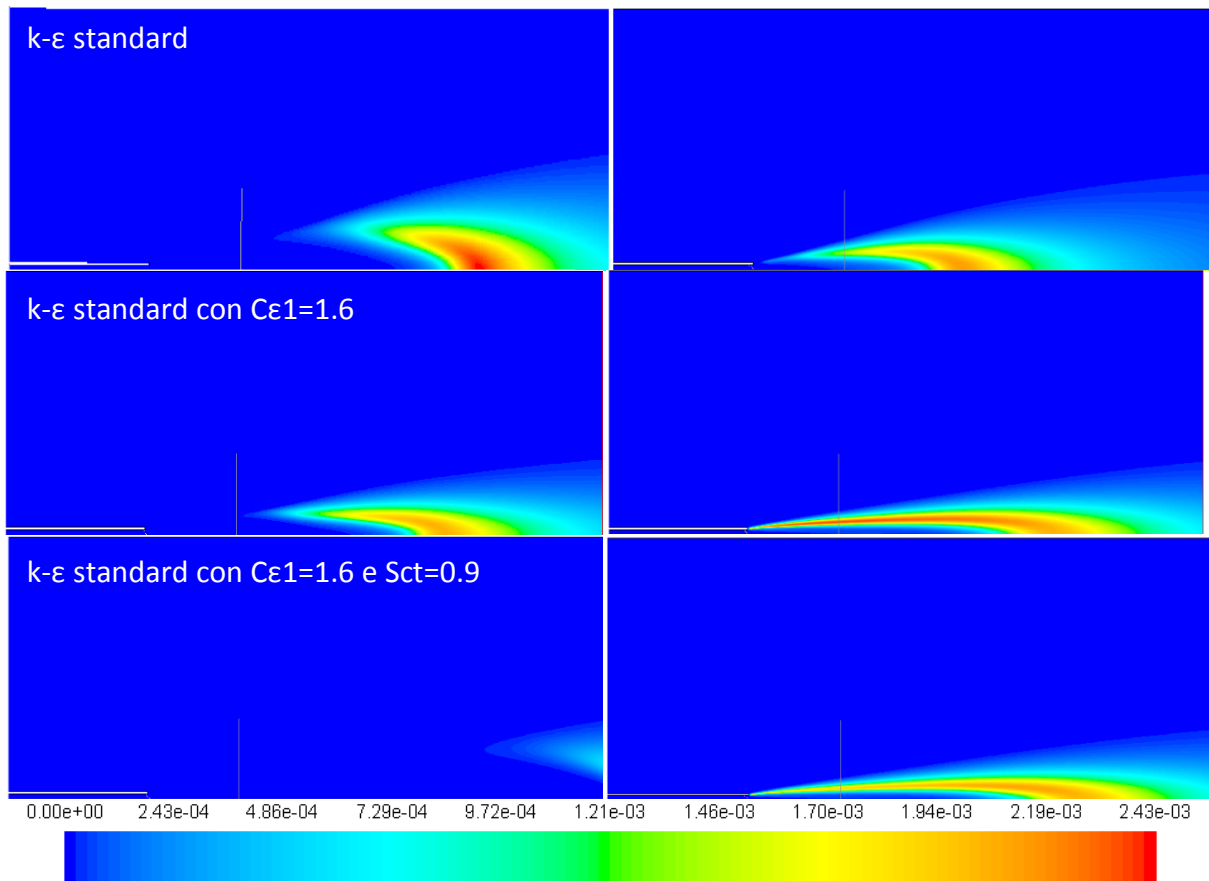
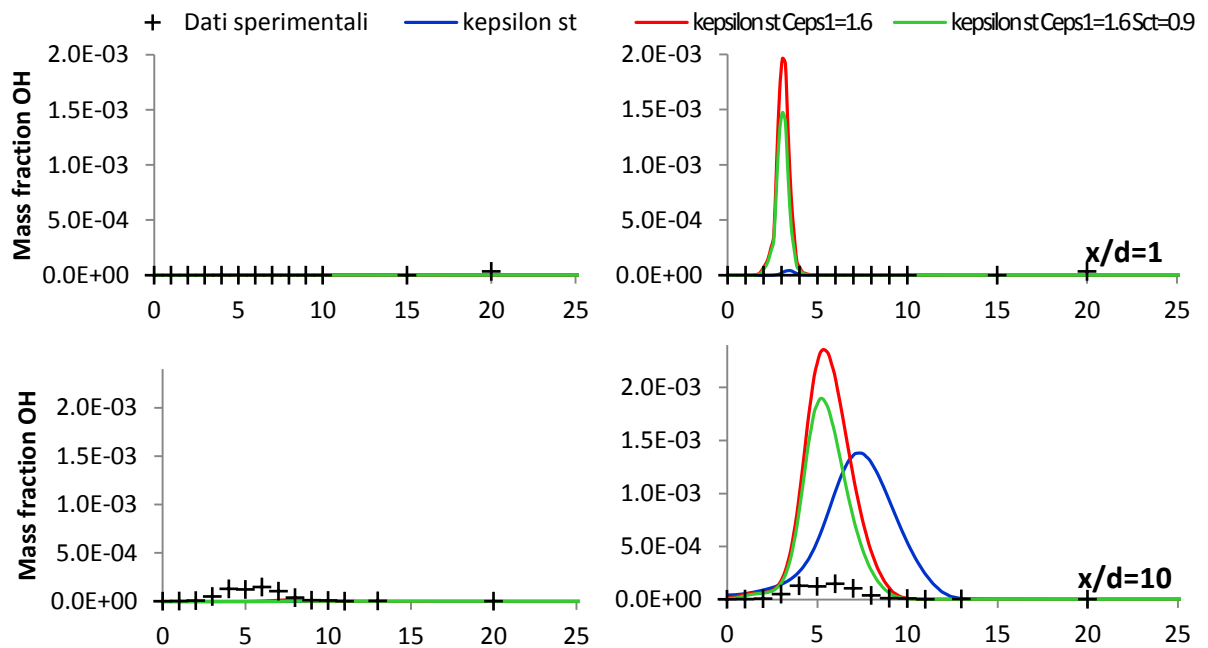


Figura 3.46 Profili frazione massica  $H_2$  senza (a sinistra) e con (a destra) l'opzione *Full Multicomponent Diffusion* per il trasporto delle specie



**Figura 3.47** Contours frazione massica OH senza (a sinistra) e con (a destra) l'opzione *Full Multicomponent Diffusion* per il trasporto delle specie



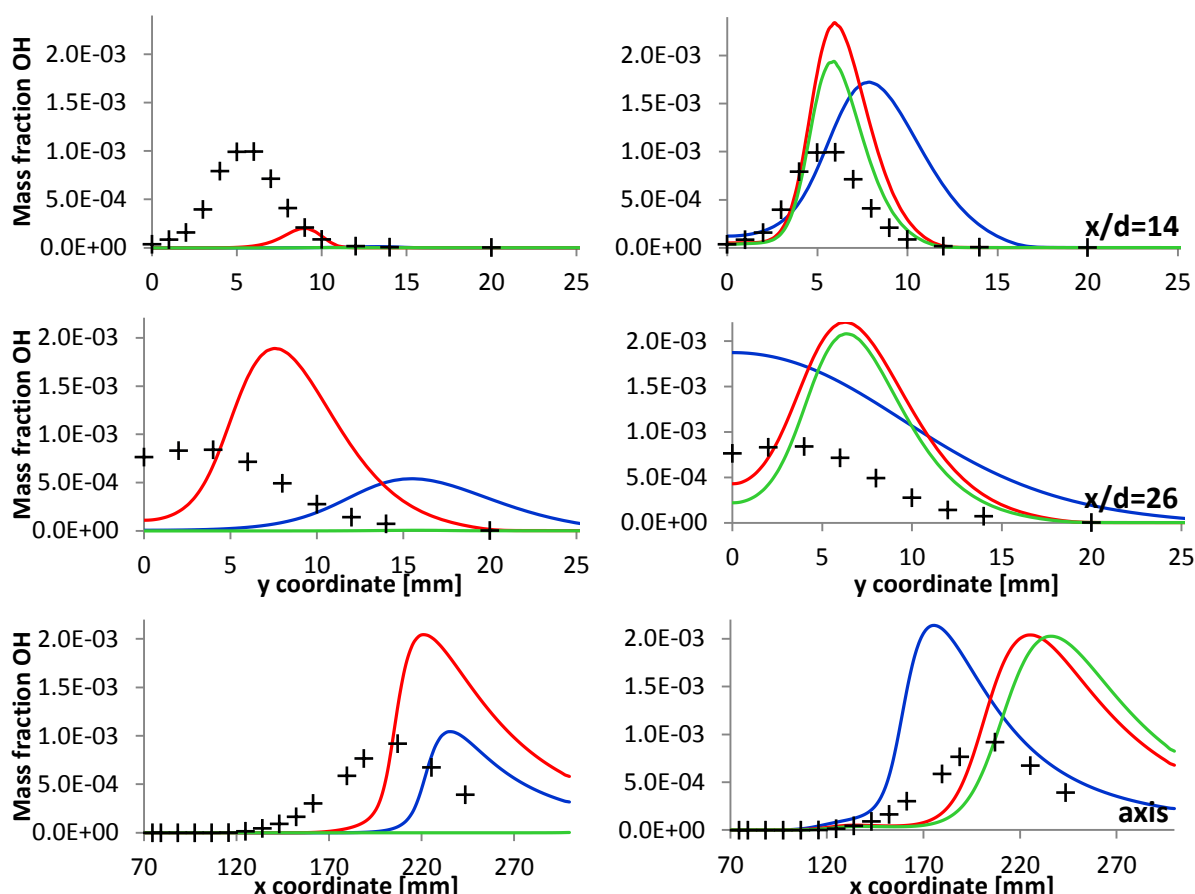


Figura 3.48 Profili frazione massica OH senza (a sinistra) e con (a destra) l'opzione *Full Multicomponent Diffusion* per il trasporto delle specie

### 3.1.7 Effetto temperatura del coflow

In questa sezione è stata valutata l'influenza della temperatura della corrente di coflow nei confronti dell'altezza di sollevamento della fiamma; in particolare è stato considerato in meccanismo cinetico globale per il quale la fiamma risulta attaccata al bordo dell'ugello ed è stata diminuita la temperatura del coflow di un  $\Delta T$  pari a 15 gradi tale da potersi comunque considerare all'interno dell'incertezza dello strumento di misurazione della temperatura.

Questo parametro sembra non influenzare la distribuzione della frazione di miscela come si vede dalle seguenti Figura 3.49 e Figura 3.50. Per quanto riguarda la temperatura, in Figura 3.51 si nota un leggero inspessimento nel caso a temperatura minore, ma non si riesce a cogliere l'andamento dei profili (Figura 3.52).

Anche la frazione massica dell'idrogeno (Figura 3.53) e della specie minore  $H_2O$  (Figura 3.55) hanno contorni praticamente congruenti nei tre casi di temperature del coflow analizzate; così come i profili risultano migliori alle temperature più basse (Figura 3.54 e Figura 3.56) ma non accettabili.

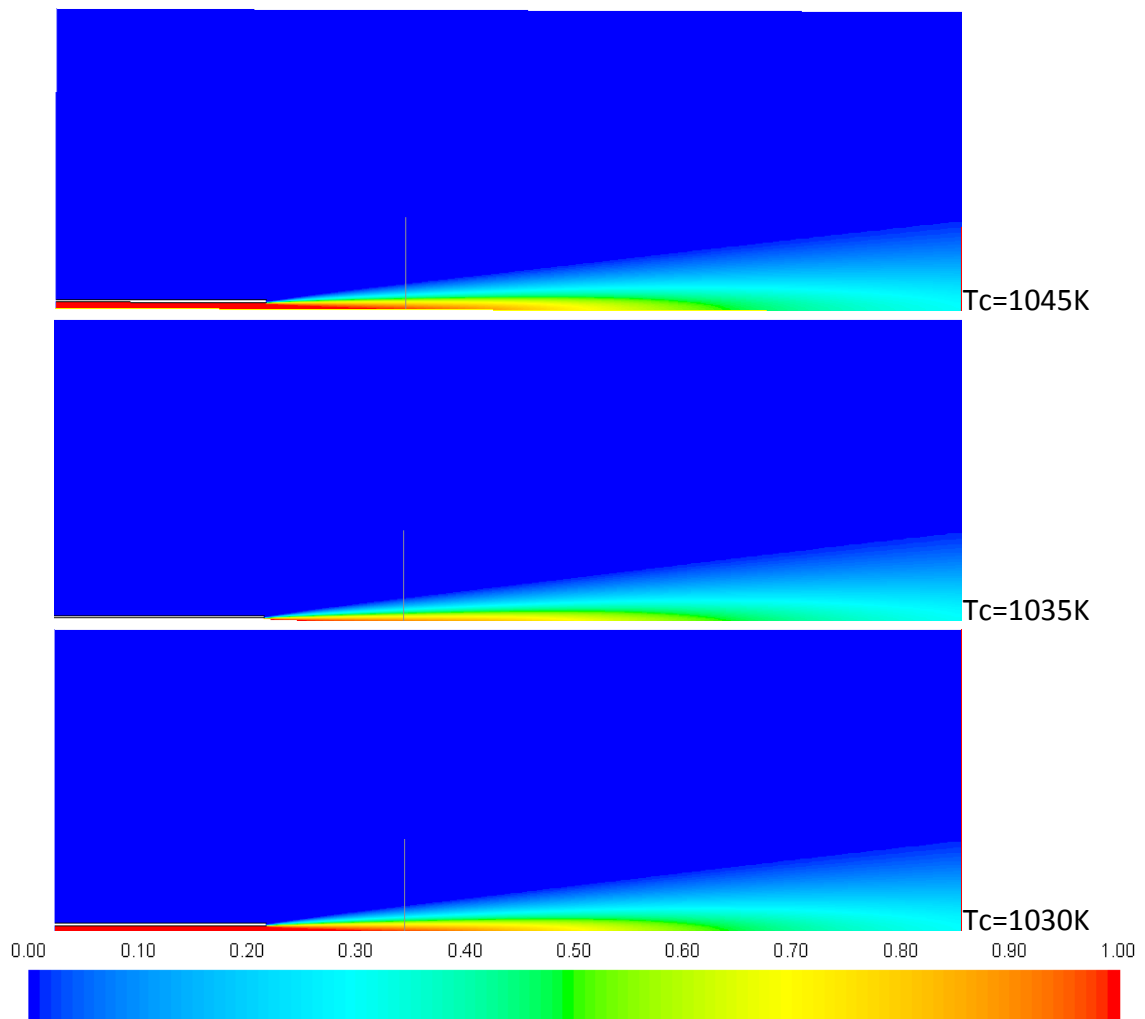


Figura 3.49 Contours *mixture fraction* al variare della  $T_{cflow}$

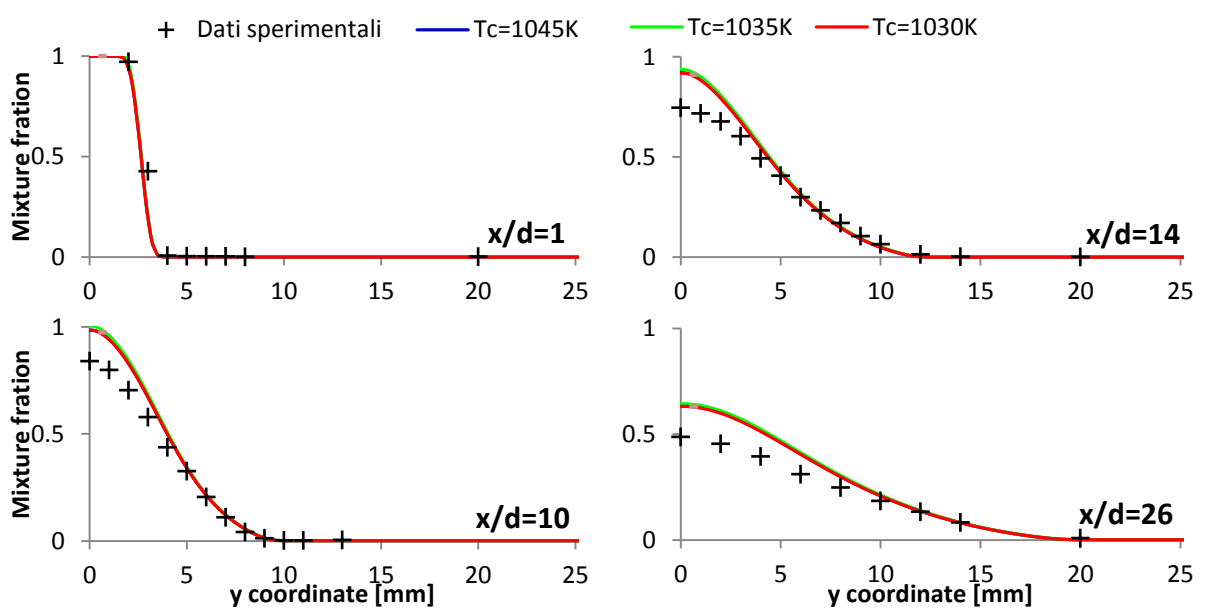


Figura 3.50 Profili radiali *mixture fraction* al variare della  $T_{cflow}$

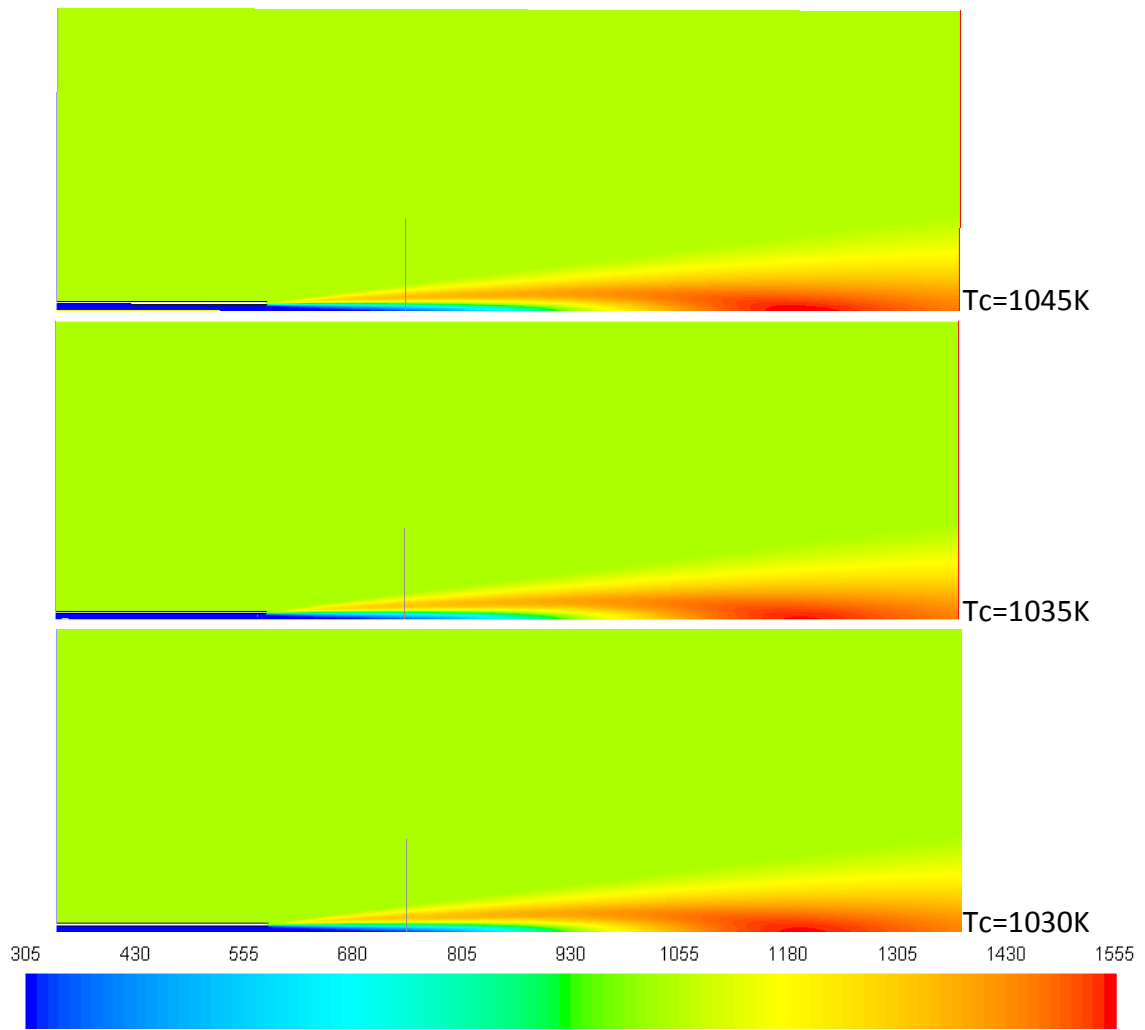


Figura 3.51 Contours temperatura al variare della Tcoflow

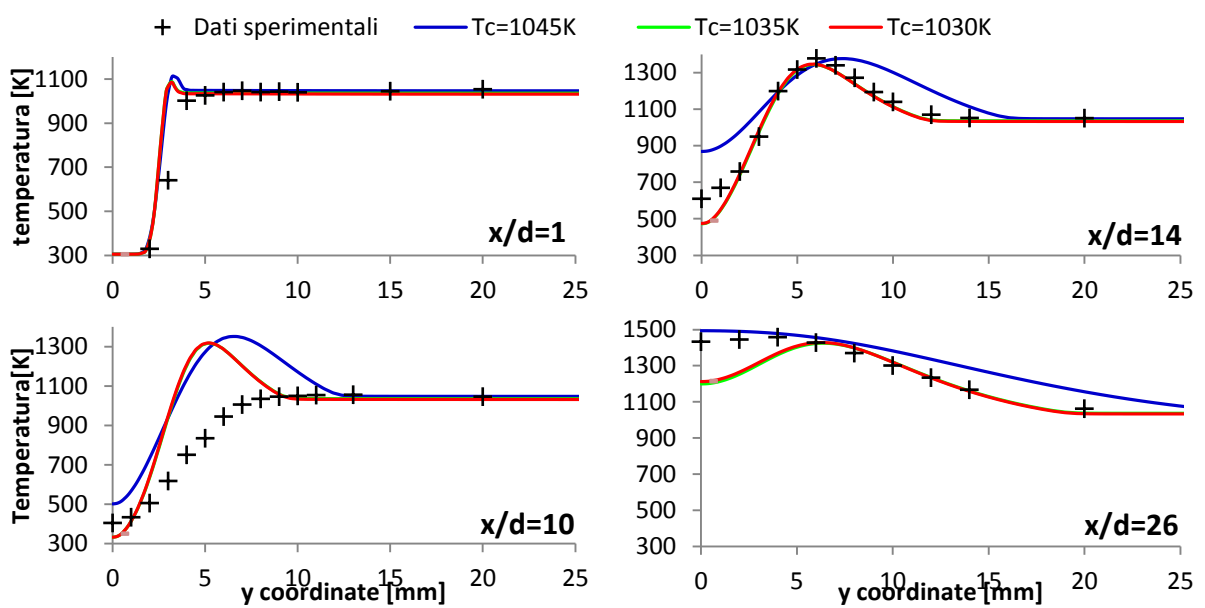


Figura 3.52 Profili temperatura al variare della Tcoflow

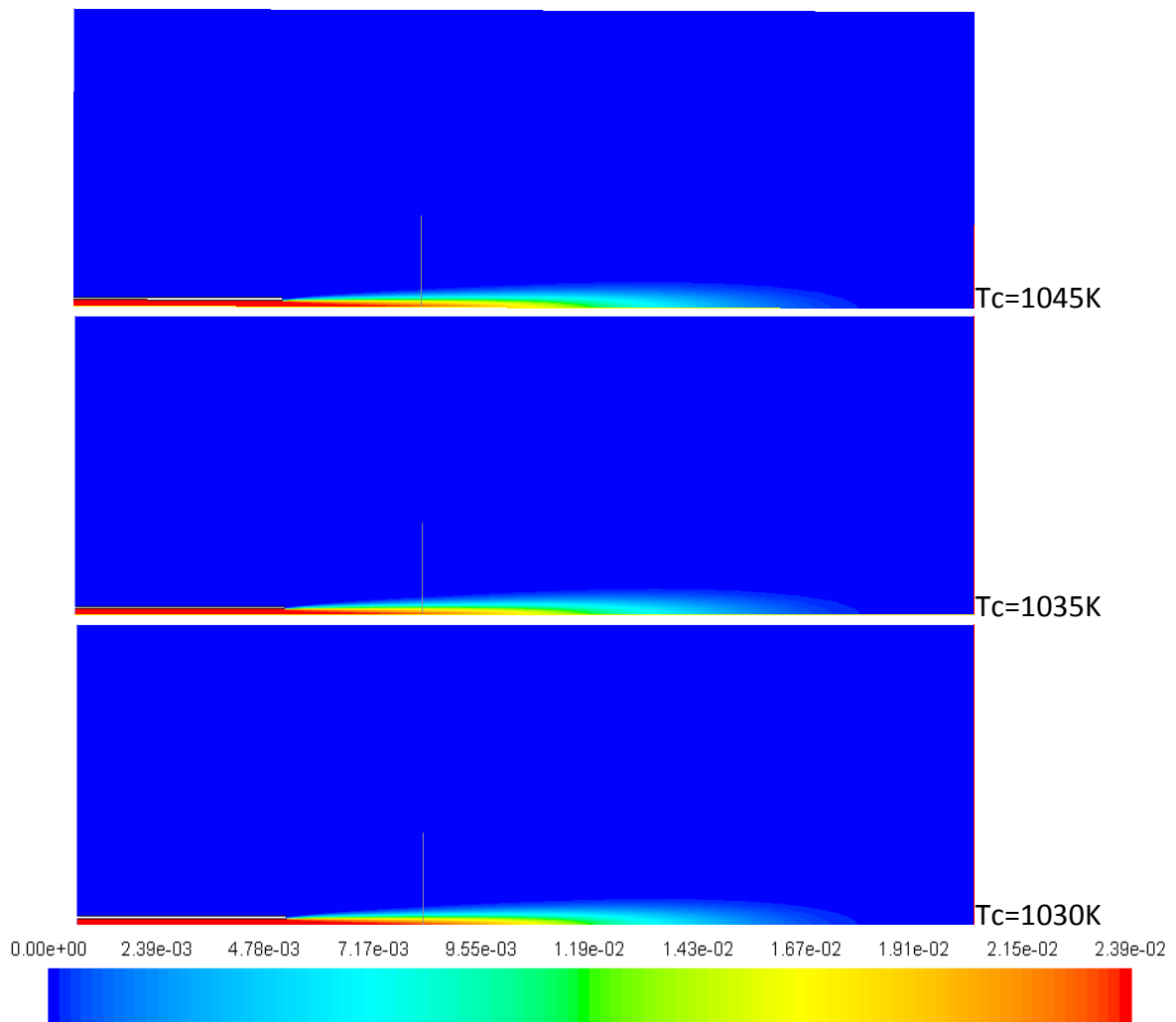


Figura 3.53 Contours frazione massica  $H_2$  al variare della  $T_{cflow}$

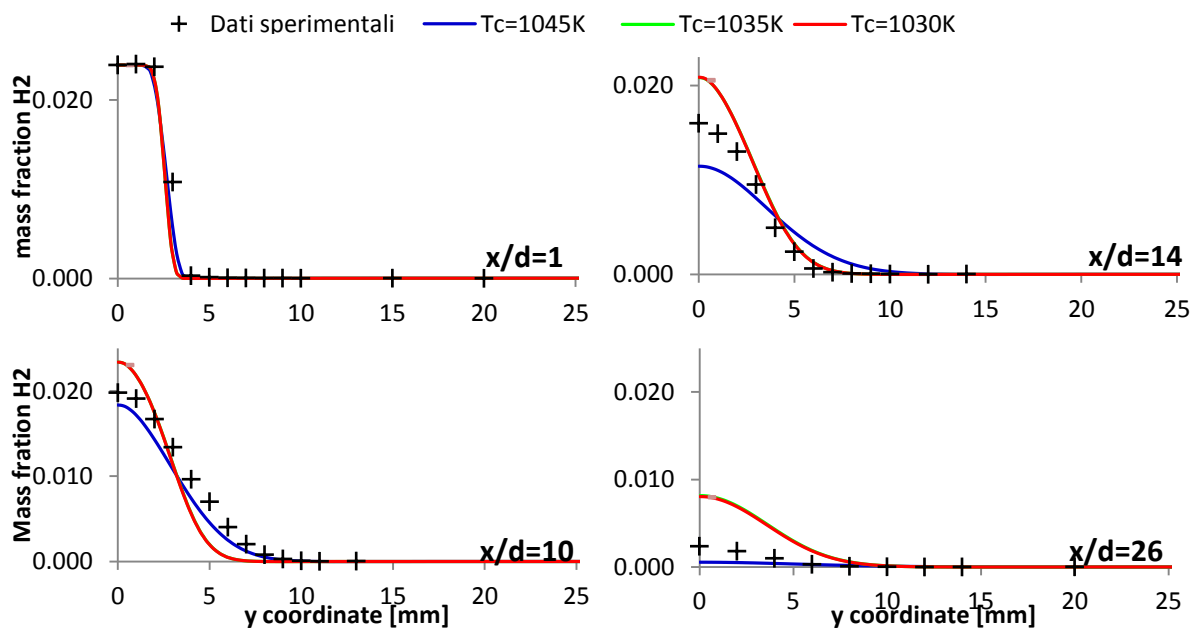
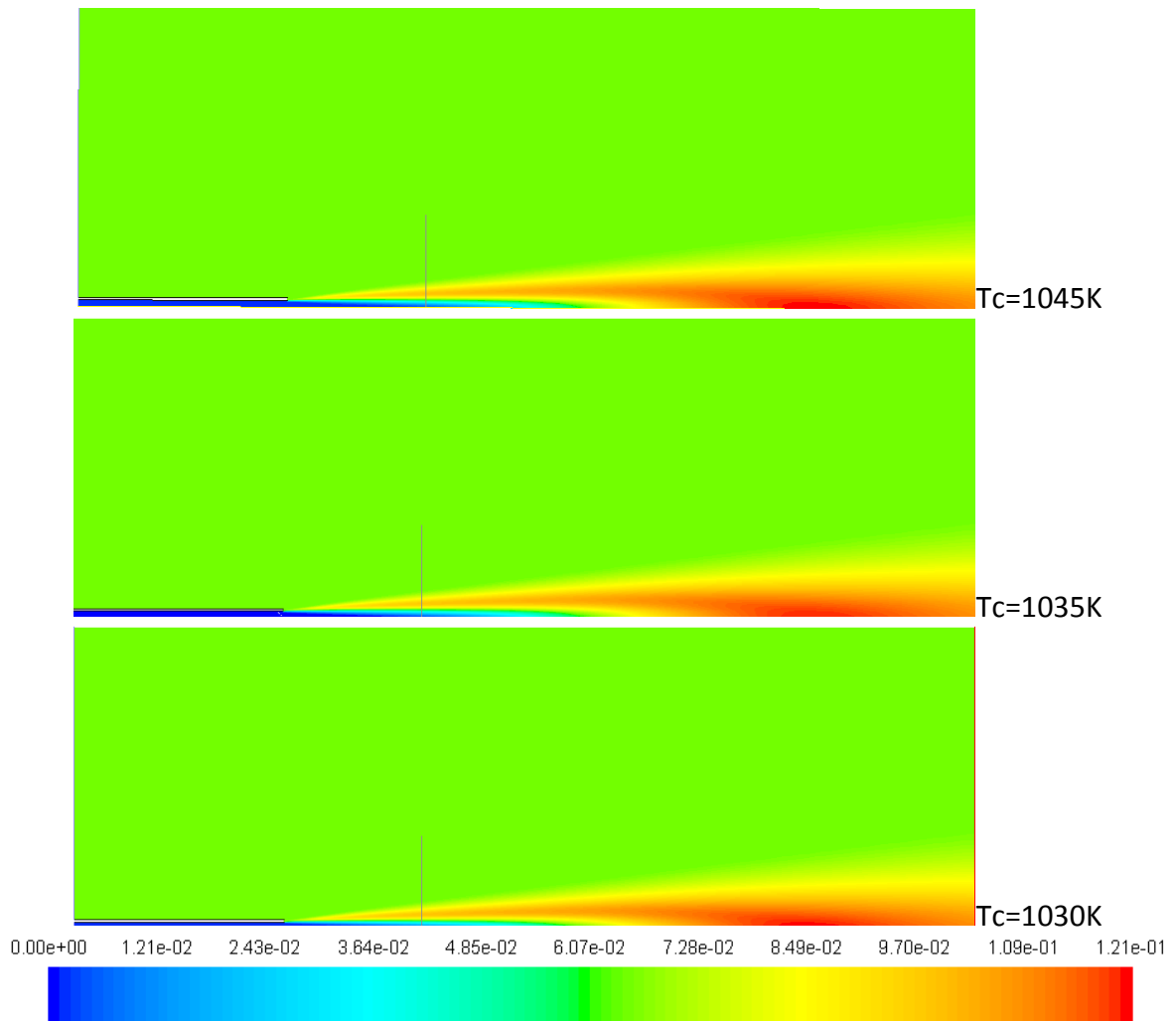
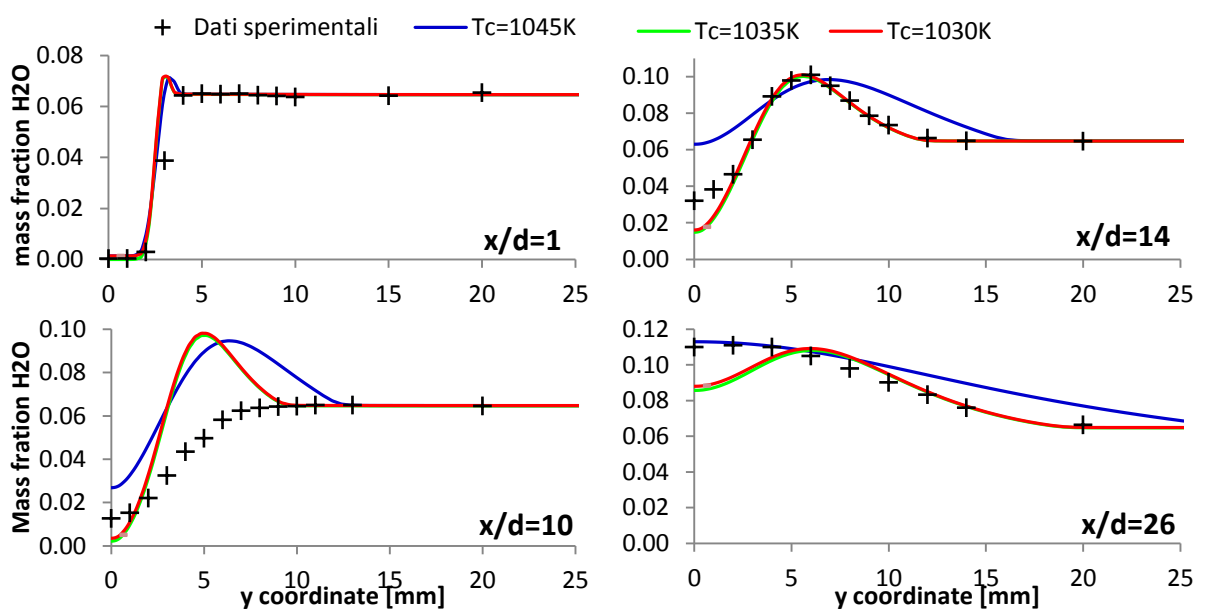


Figura 3.54 Profili frazione massica  $H_2$  al variare della  $T_{cflow}$

Figura 3.55 Contours frazione massica  $H_2O$  al variare della  $T_{cflow}$ Figura 3.56 Profili frazione massica  $H_2O$  al variare della  $T_{cflow}$

## 3.2 Modified PDF transport

Tutte le simulazioni i cui risultati sono presenti nei seguenti paragrafi sono state condotte a parità di meccanismo dettagliato San Diego, modello di turbolenza k- $\epsilon$  standard con  $C_{\epsilon 1}=1.6$  e  $S_{ct}=0.9$ . Inoltre, il numero di particelle per cella per le quali calcolare la composizione è stato scelto pari a 100.

Altro fatto da tenere in considerazione per questo approccio è l'utilizzo di una griglia ridotta rispetto ai casi precedenti che si origina all'altezza dell'uscita dell'ugello e alle cui condizioni al contorno sono stati implementati i profili di velocità ottenuti dai calcoli sulla griglia completa.

### 3.2.1 Effetto mixing models

Sono stati raffrontati due modelli di miscelamento Modified Curl MCurl e Euclidean Minimum Spanning Tree EMST a parità di costante  $C_{\phi}=2$  di default.

A una prima analisi dei contorni della frazioni di miscela di Figura 3.57 non sono riscontrabili differenze nelle predizioni dei due modelli; ma dall'analisi dei profili radiali e assiali di Figura 3.58 si nota un buon accordo con i risultati sperimentali in entrambi i casi, in particolare, i valori efficaci mostrano un migliore accordo da parte del metodo MCurl.

Anche i contorni di temperatura (Figura 3.59) non si discostano tra loro; mentre i profili (Figura 3.60) si rivelano in buon accordo seppur non in grado di cogliere l'altezza di sollevamento misurata.

Per quanto riguarda la frazione massica dell' $O_2$ , i contorni (Figura 3.61) sono molto simili e i profili radiali e assiale (Figura 3.62) si discostano maggiormente in confronto a quelli della grandezza precedente.

Questo fenomeno è ancora più accentuato per la frazione massica del radicale OH (Figura 3.63 e Figura 3.64) i cui profili sono ancora lontani dai valori misurati anche se ne rispettano l'andamento.



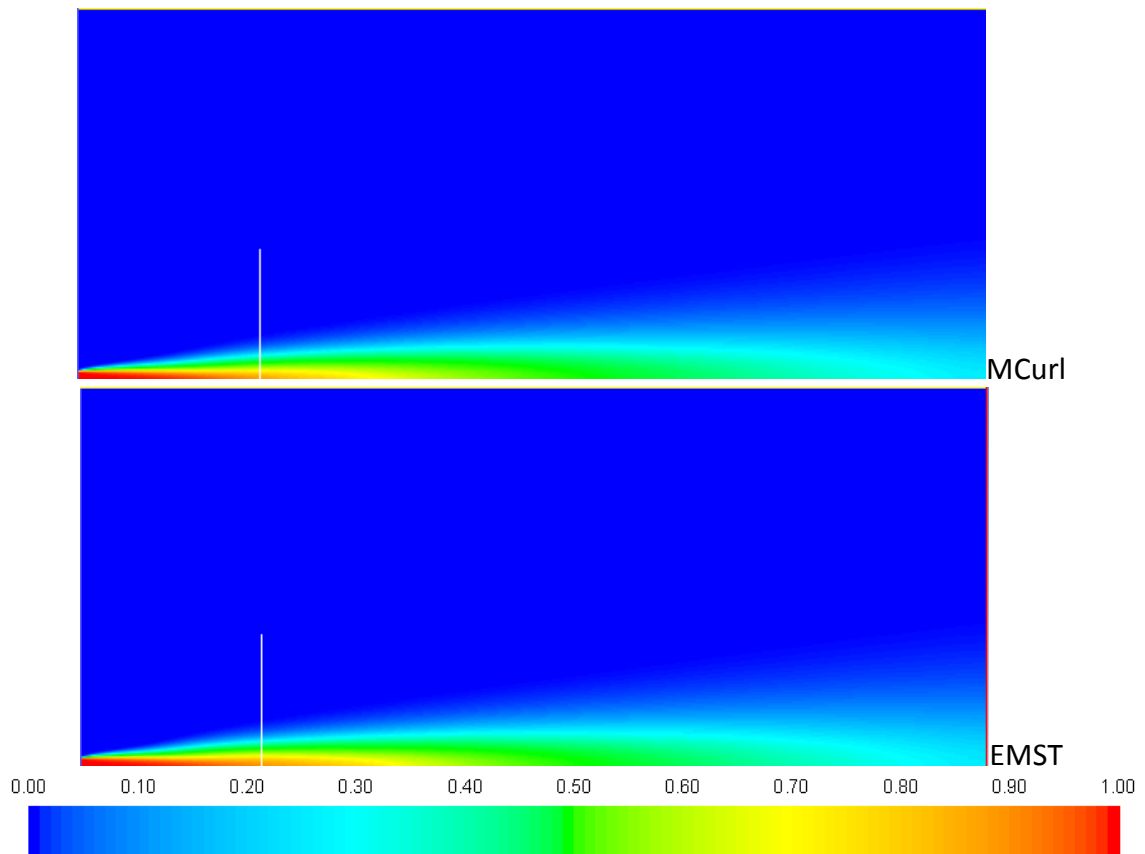
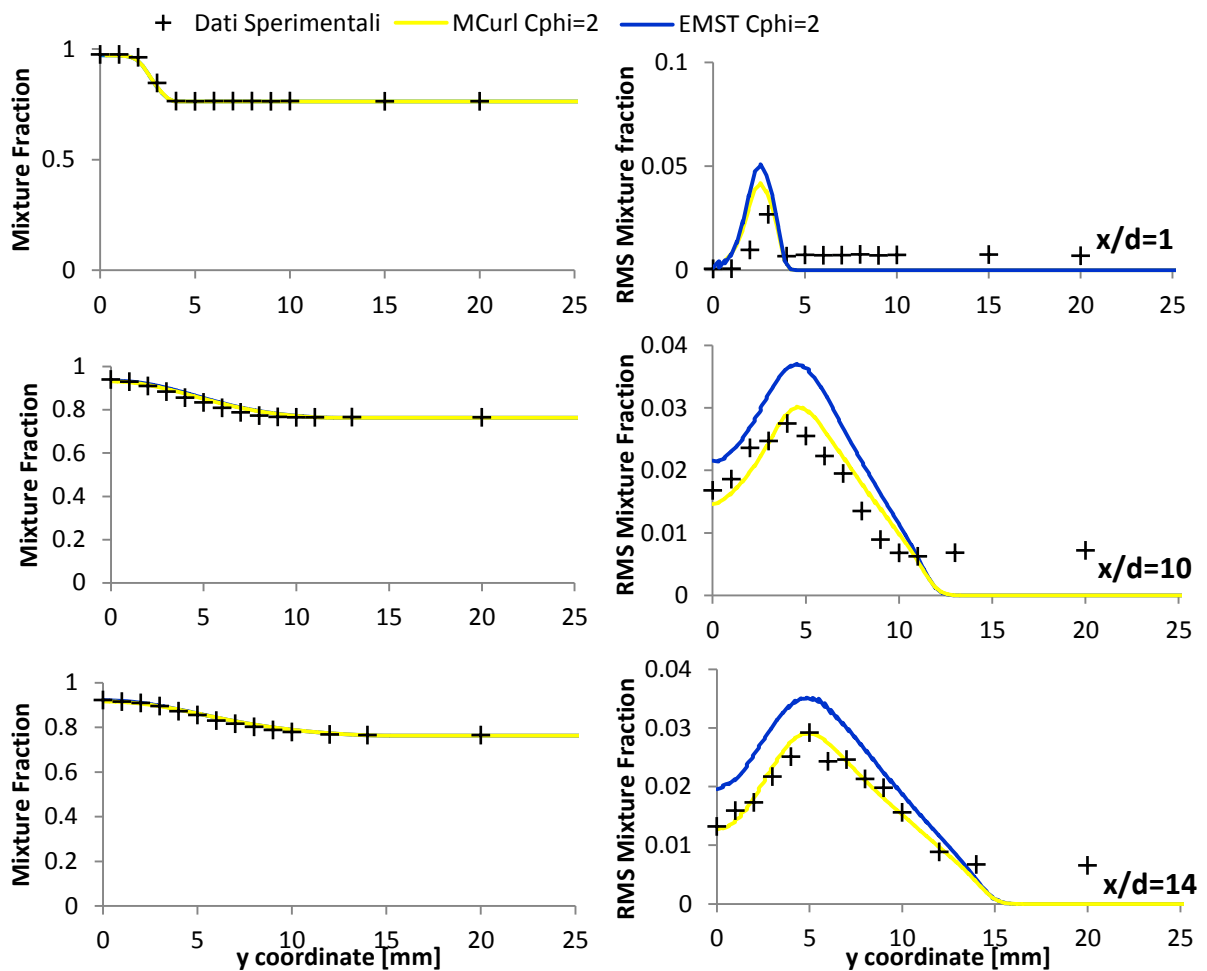


Figura 3.57 Contours *mixture fraction* al variare del modello di miscelamento



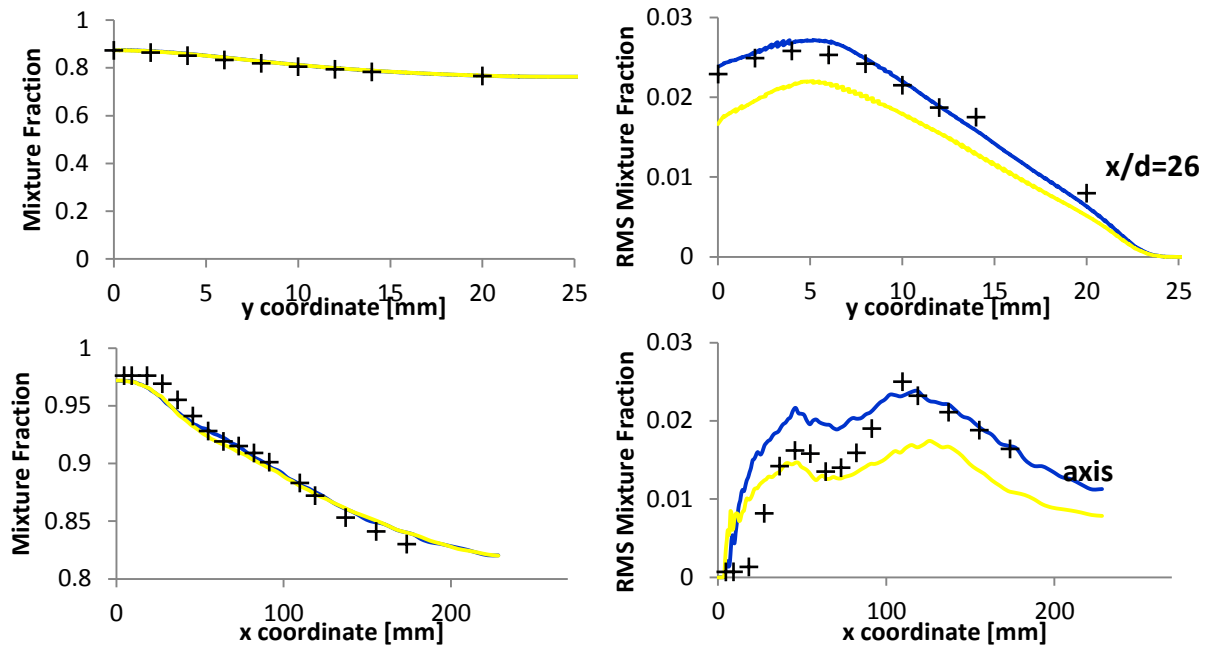


Figura 3.58 Profili *mixture fraction* al variare del modello di miscelamento

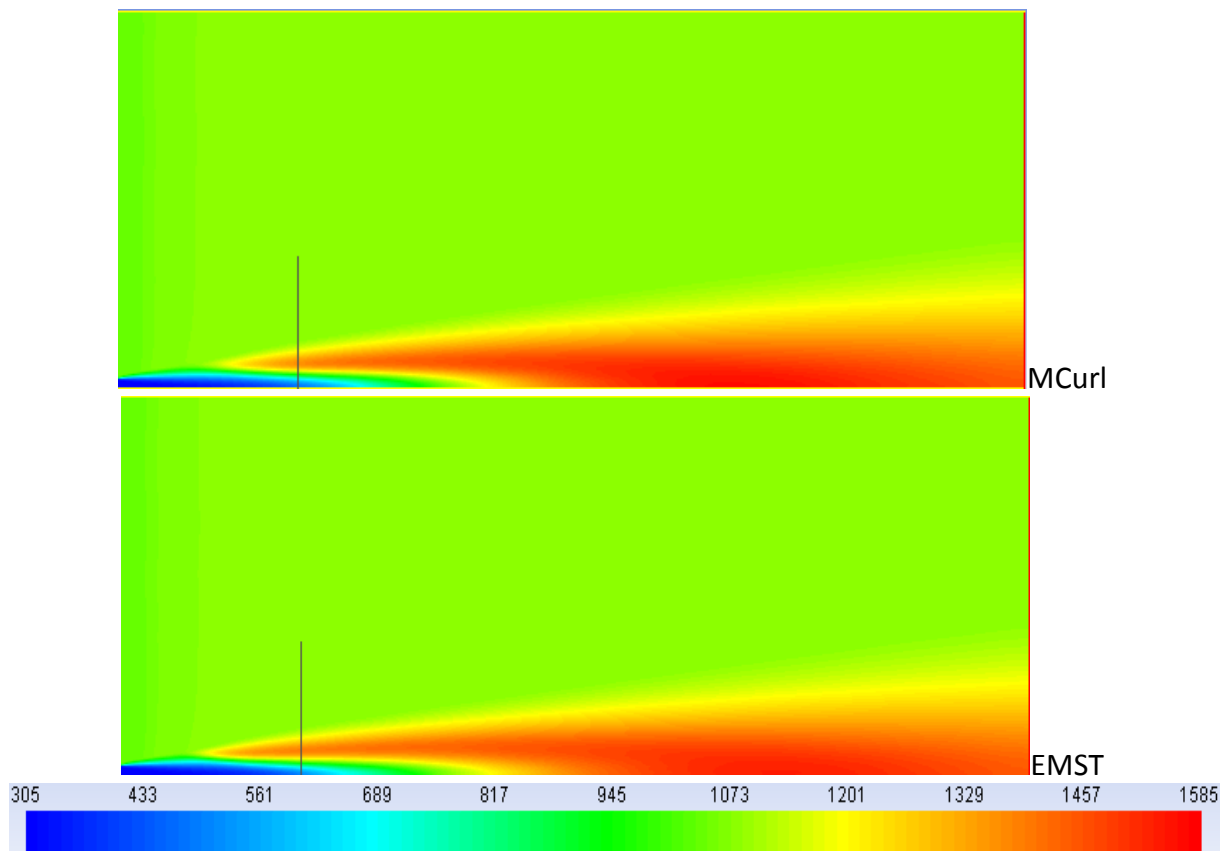


Figura 3.59 Contours temperatura al variare del modello di miscelamento

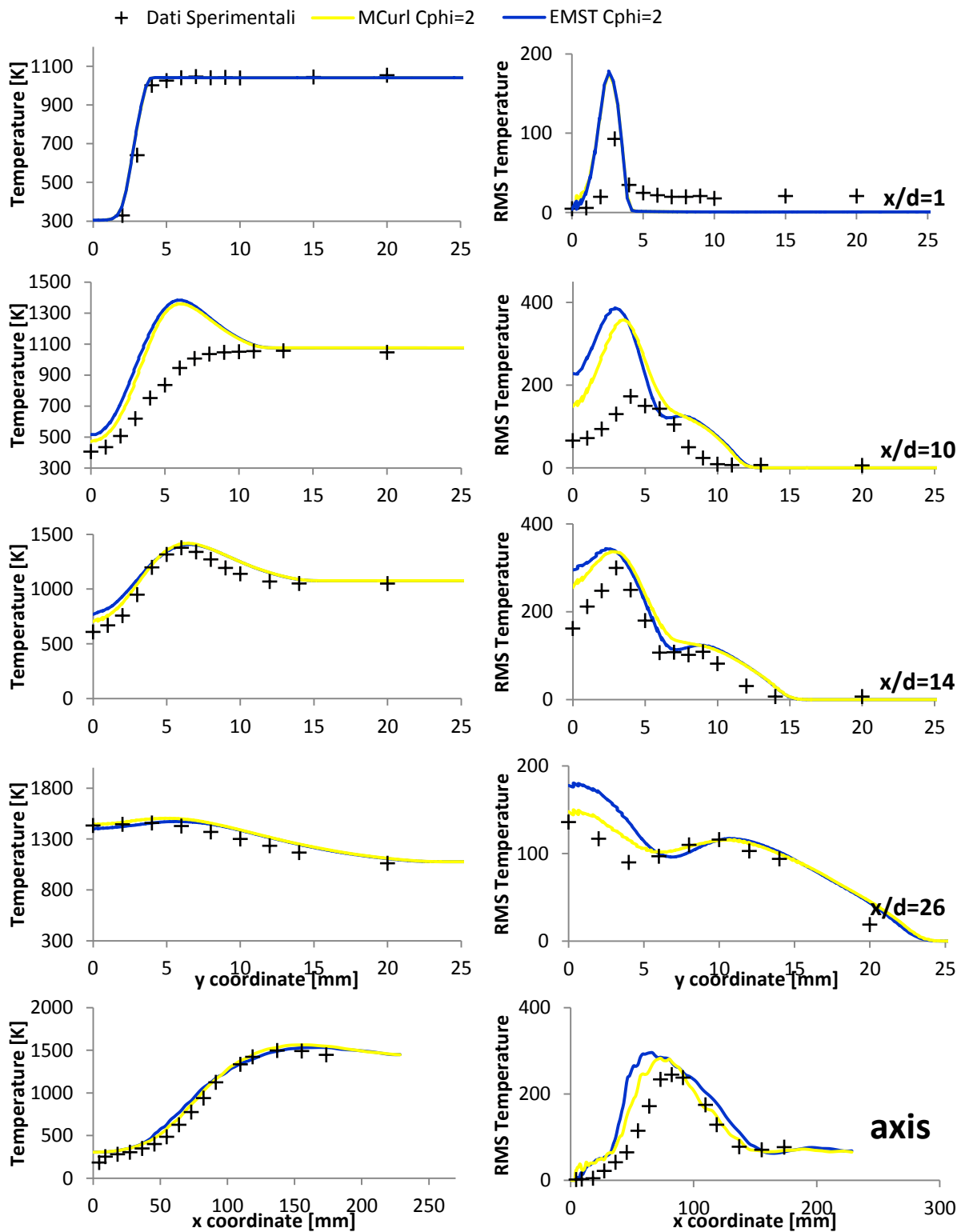


Figura 3.60 Profili temperatura al variare del modello di miscelamento

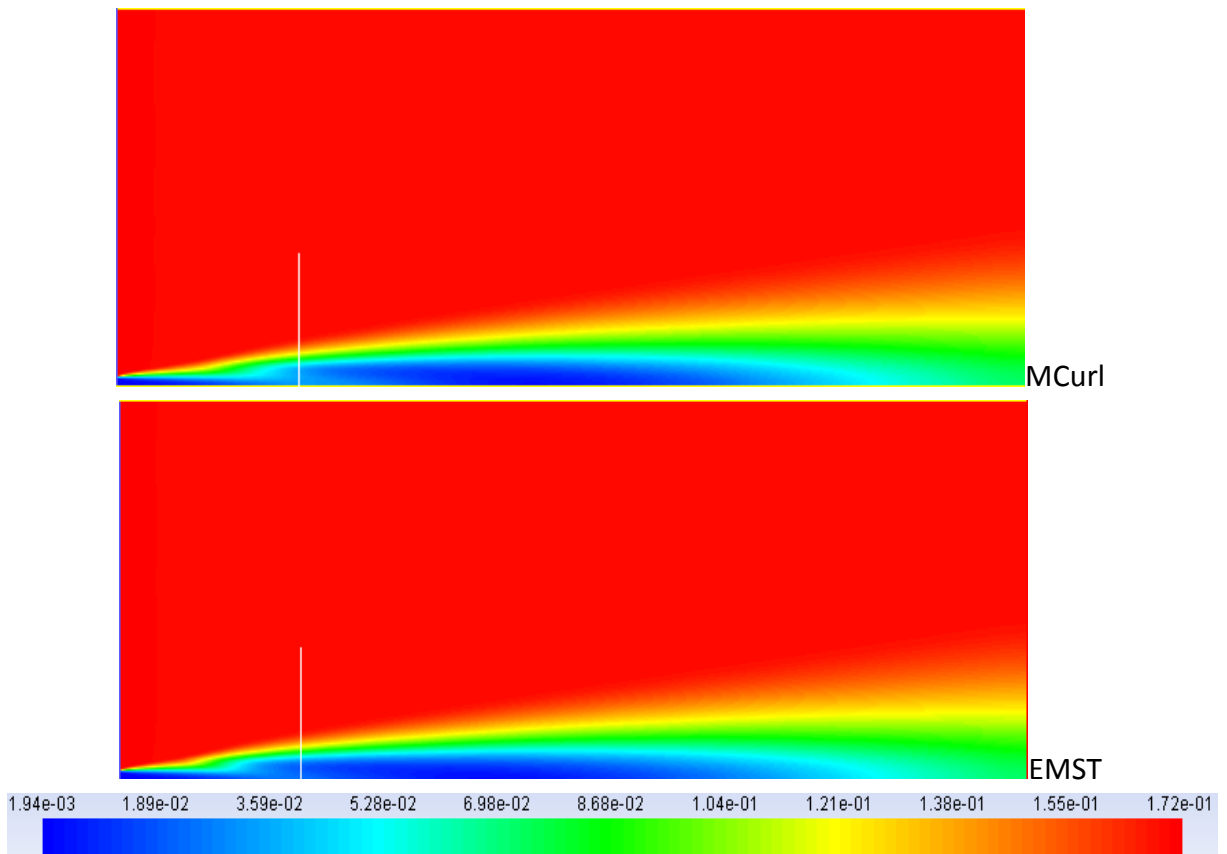
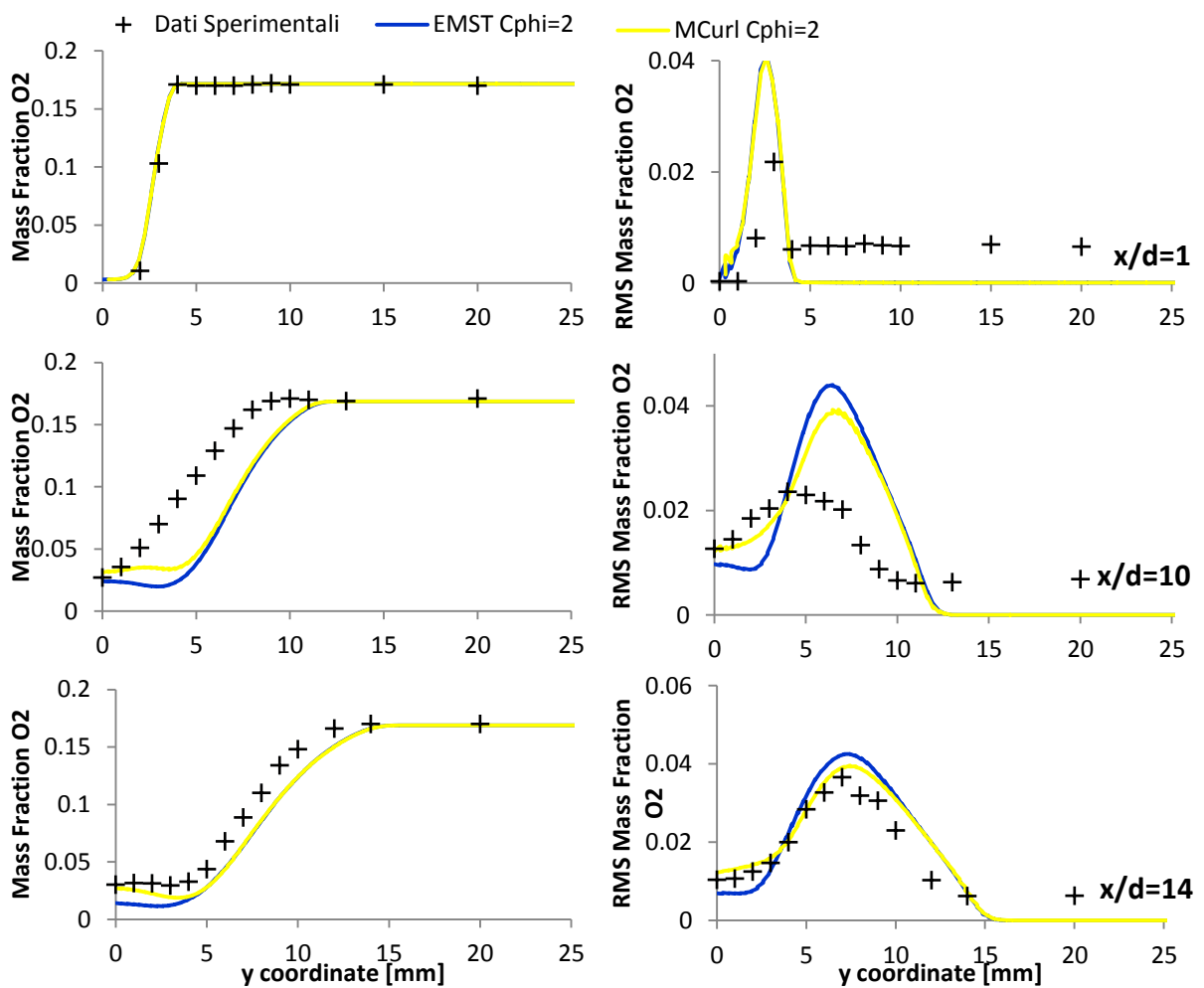


Figura 3.61 Contours mass fraction O<sub>2</sub> al variare del modello di miscelamento



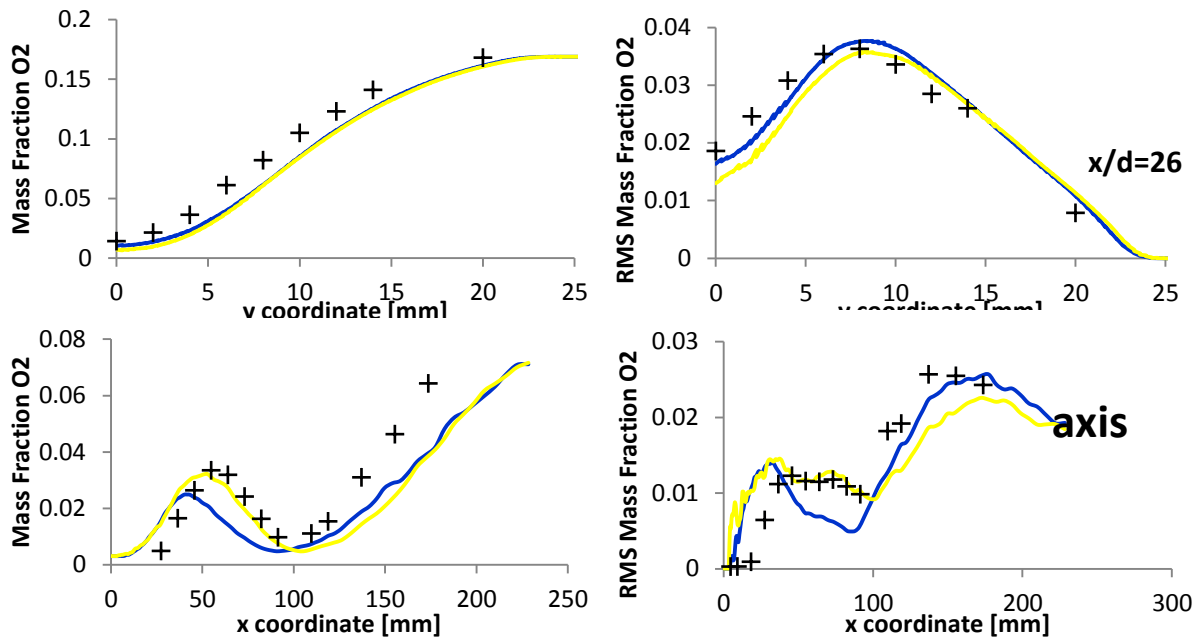


Figura 3.62 Profili mass fraction O<sub>2</sub> al variare del modello di miscelamento

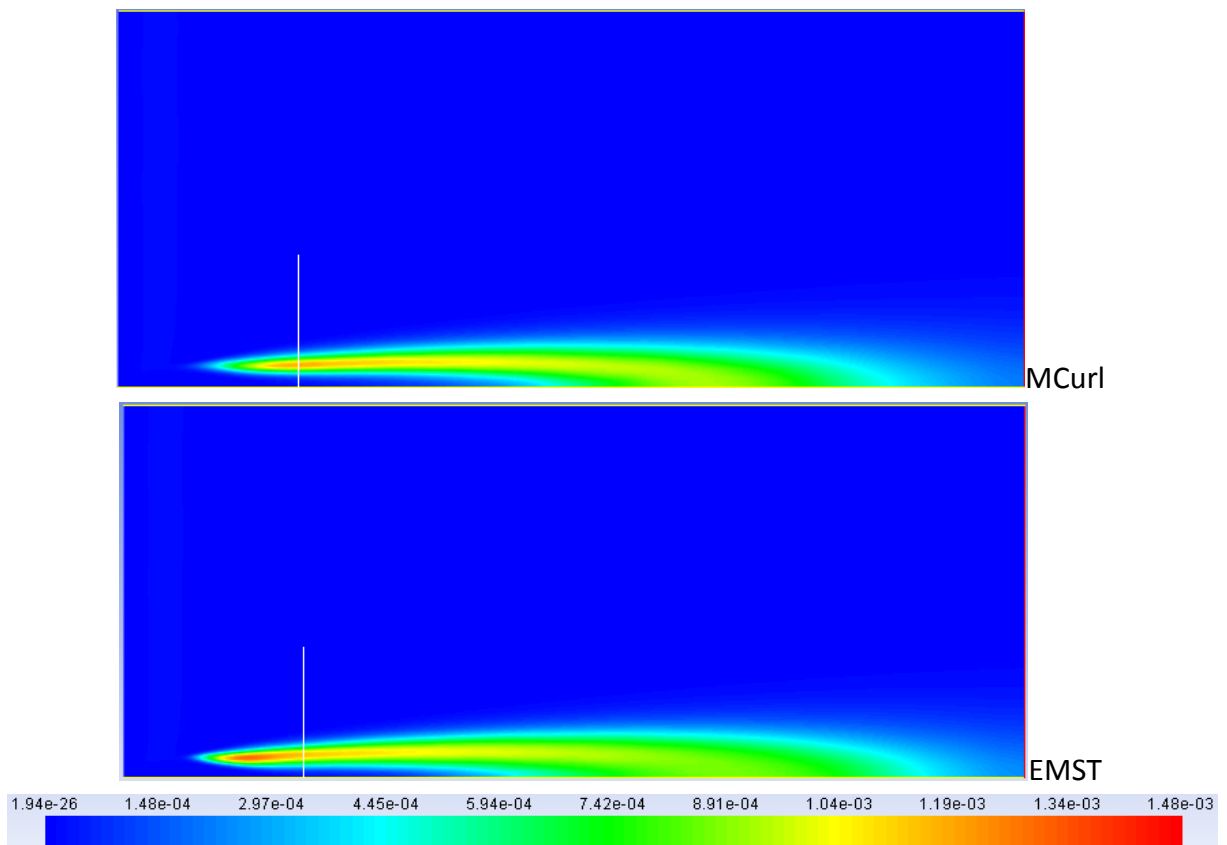
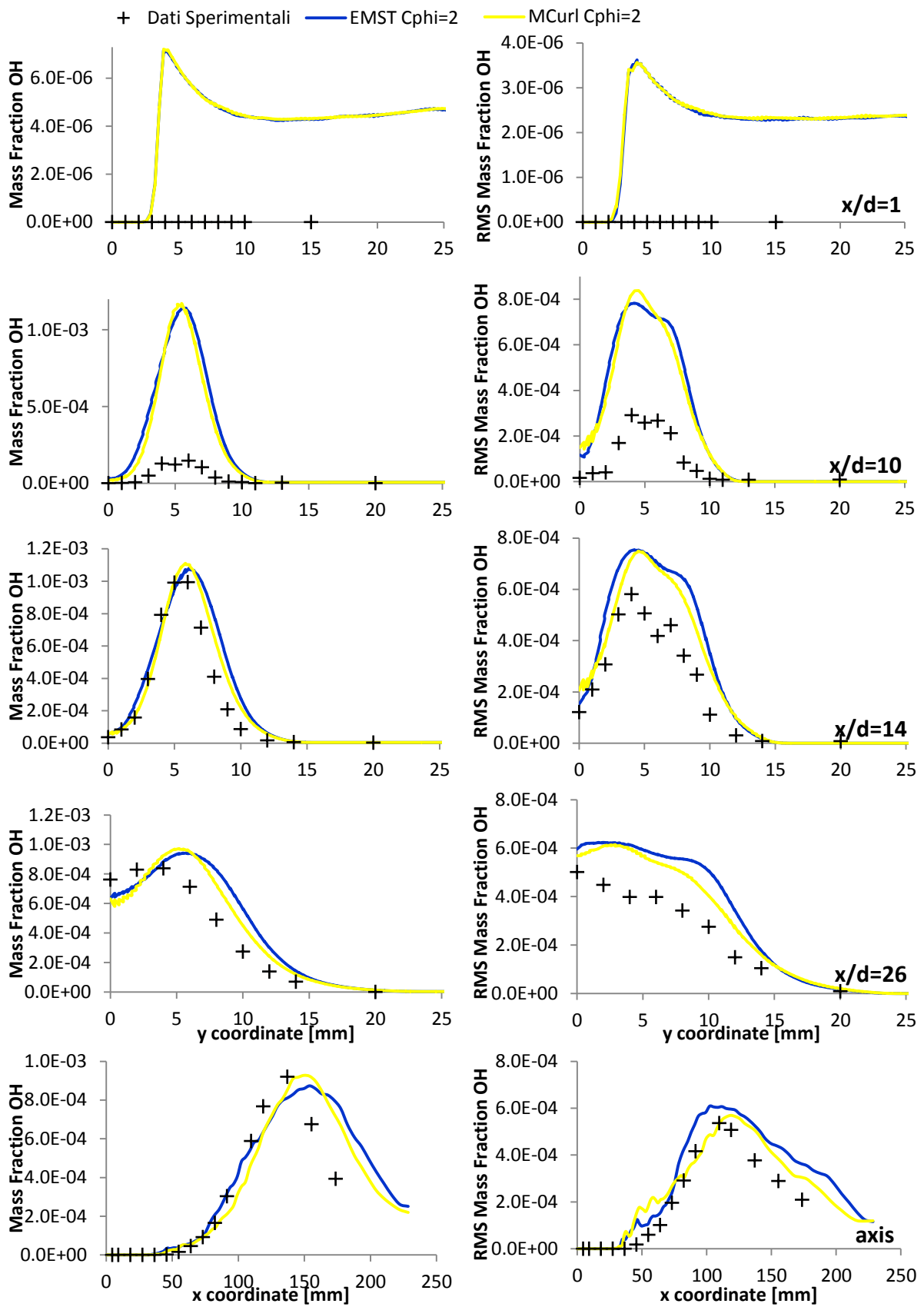


Figura 3.63 Contours mass fraction OH al variare del modello di miscelamento

Figura 3.64 Profili frazione massa OH al variare di  $C\phi$

### 3.2.2 Effetto mixing constant $C\phi$

A parità di modello di miscelamento è stato fatto variare il valore della costante  $C\phi$  in modo da ricavarne il valore che consente i migliori risultati.

Anche in questo caso i contorni della frazione di miscela, rappresentati in Figura 3.65, sono poco distinguibili tra loro a meno di un aumento dell'ampiezza della zona povera di combustibile con  $z \approx 0.3$  nel caso di costante  $C\phi=3$ . Per quanto riguarda i profili (Figura 3.66), essi seguono in maniera molto precisa i valori sperimentali anche se i valori efficaci dei profili radiali risultano sovrastimati.

Tutti e tre i contorni di temperatura (Figura 3.67) mostrano delle altezze di sollevamento pari a circa la metà di quella misurata e i relativi profili (Figura 3.68) confermano l'anticipo di ignizione prima della quota assiale  $x/d=10$  e di conseguenza i valori RMS si discostano molto da quelli misurati.

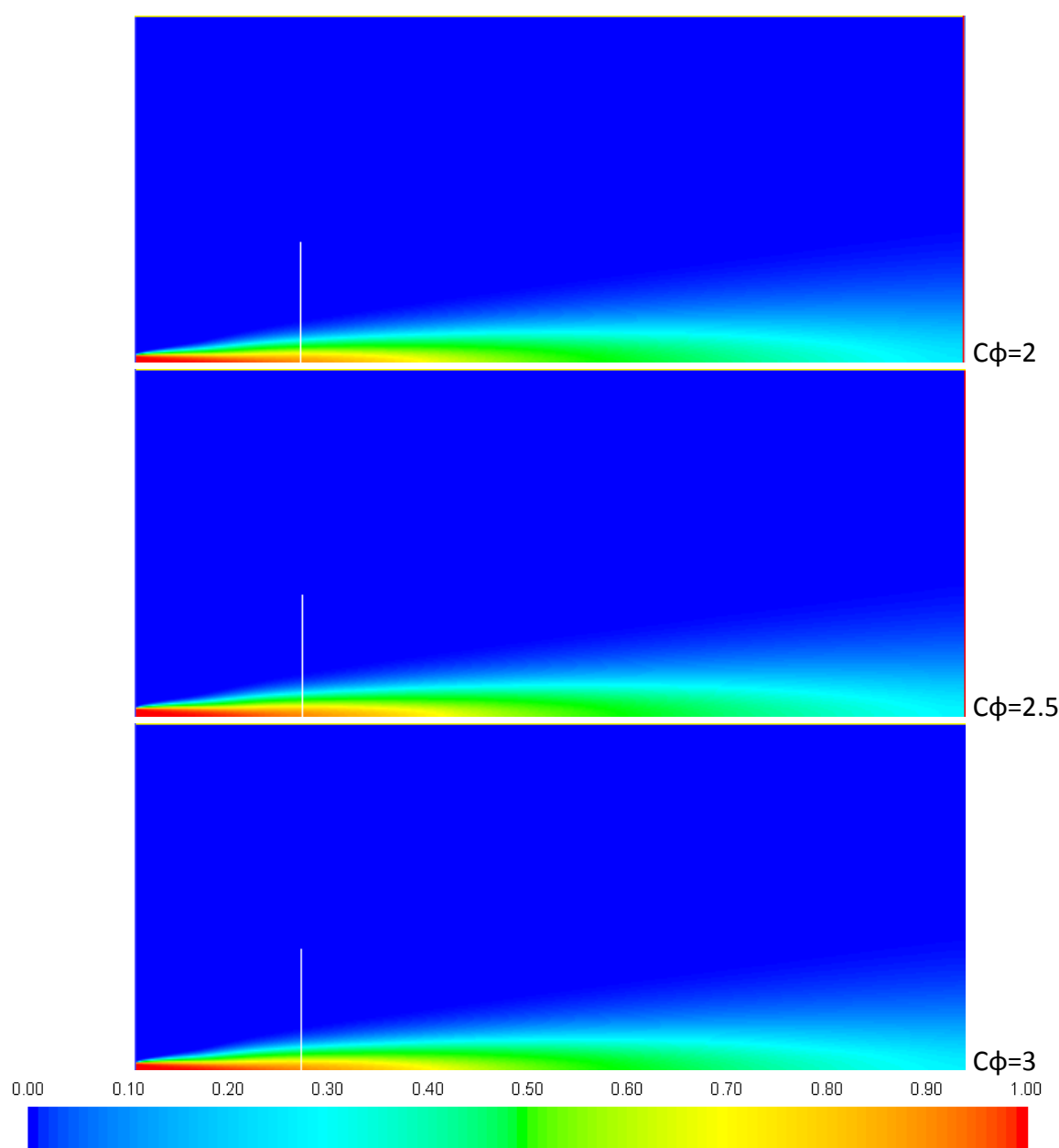
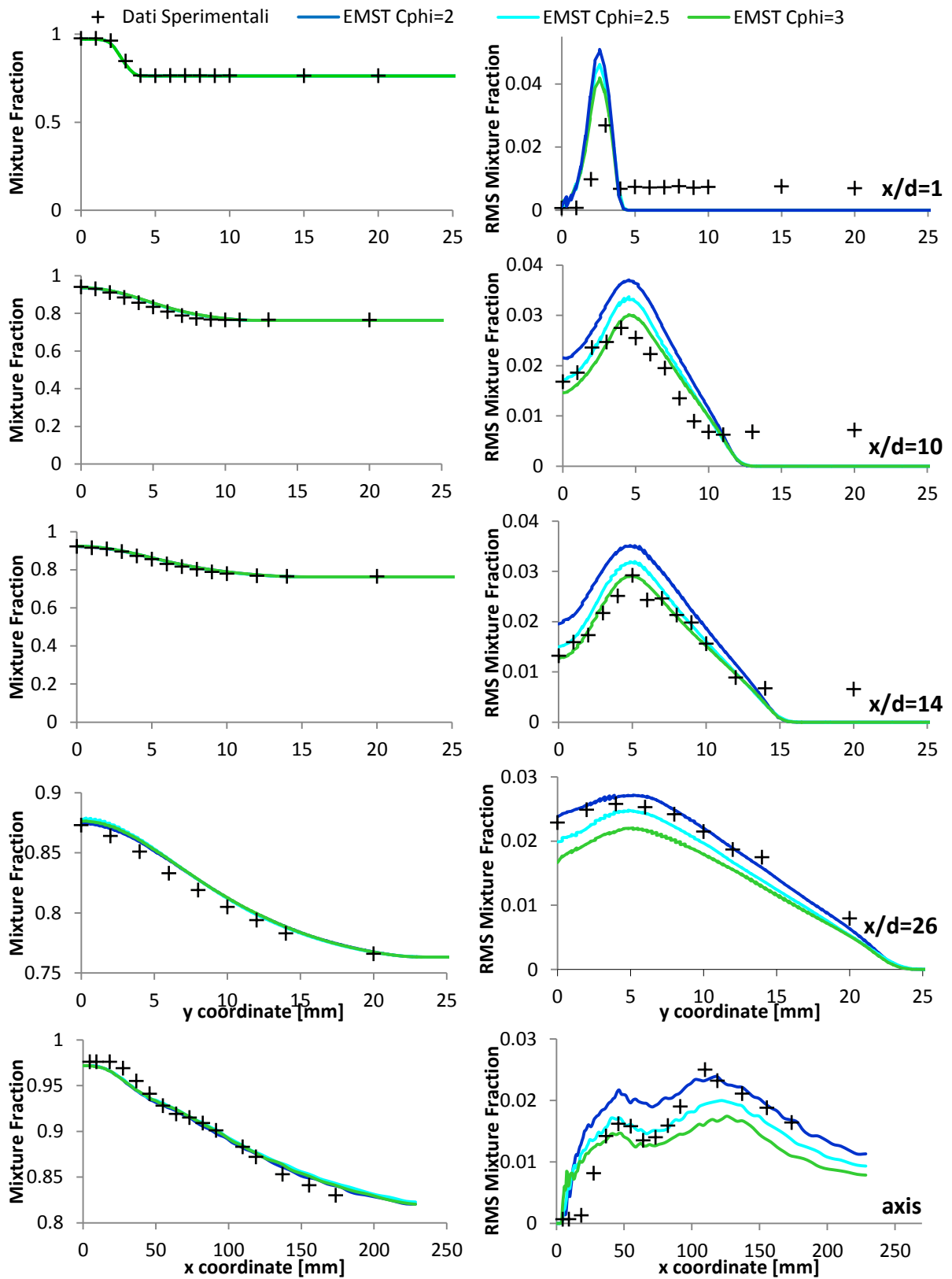
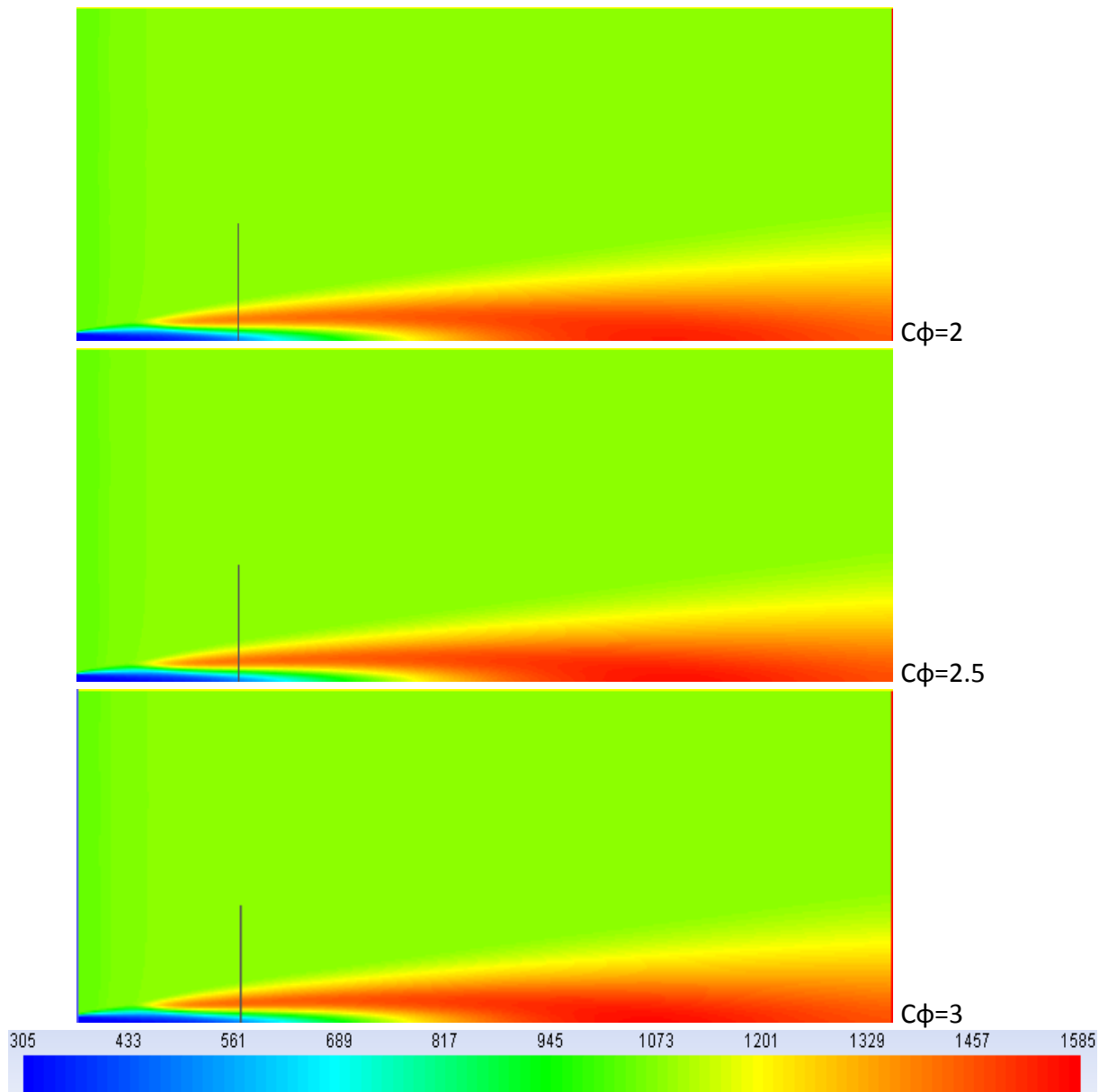
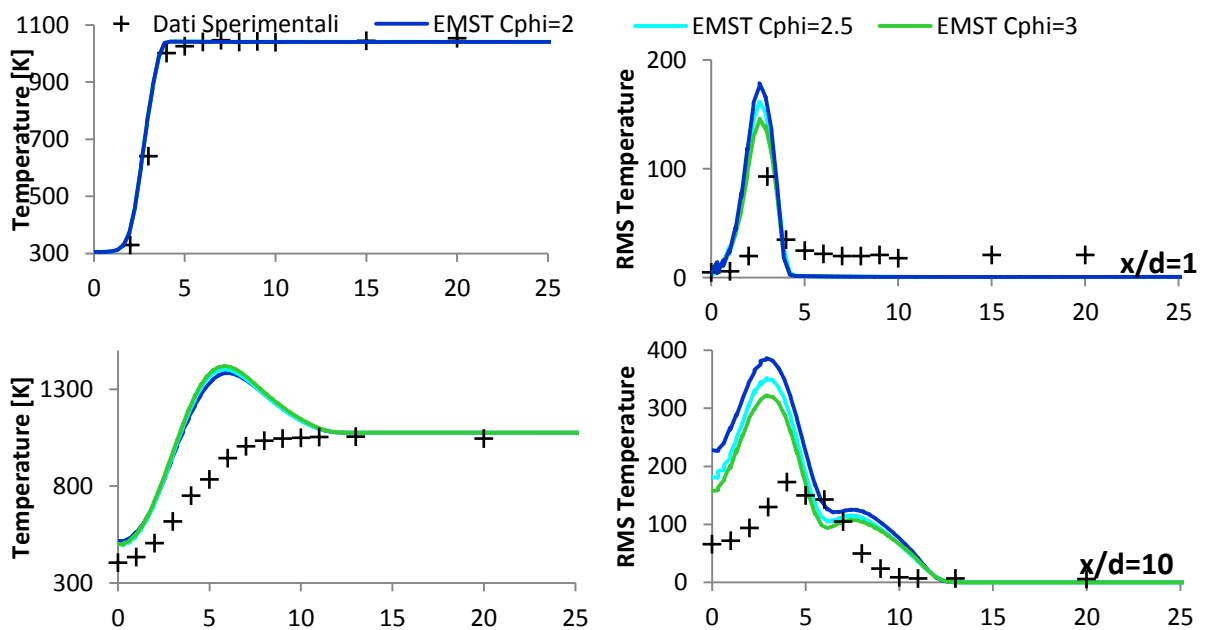


Figura 3.65 Contours *mixture fraction* al variare di  $C\phi$

Figura 3.66 Profili mixture fraction al variare di  $C_\phi$



Figura 3.67 Contours temperatura al variare di  $C\phi$ 

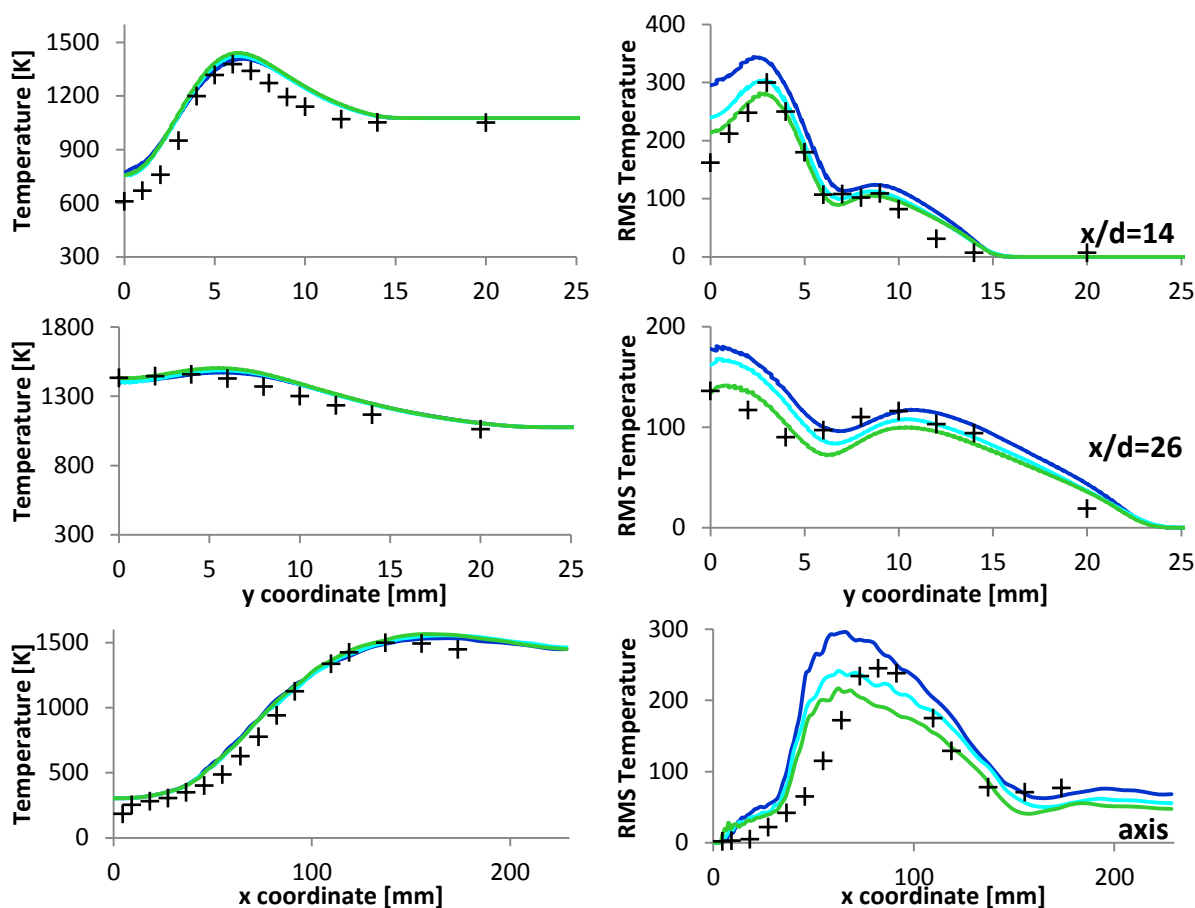


Figura 3.68 Profili temperatura al variare di  $C\phi$

Di seguito sono riportati i contorni (Figura 3.69 e Figura 3.71) e i profili (Figura 3.70 e Figura 3.72) della frazione massica della specie  $O_2$  e del radicale  $OH$ . In particolare quest'ultimi mostrano scostamenti rispetto ai profili sperimentali ma nel complesso gli andamenti possono essere considerati in buon accordo.

In tutti i casi la scelta del valore di  $C\phi$  pari a 3 sembra portare un buon accordo con i valori efficaci RMS di tutte le grandezze.

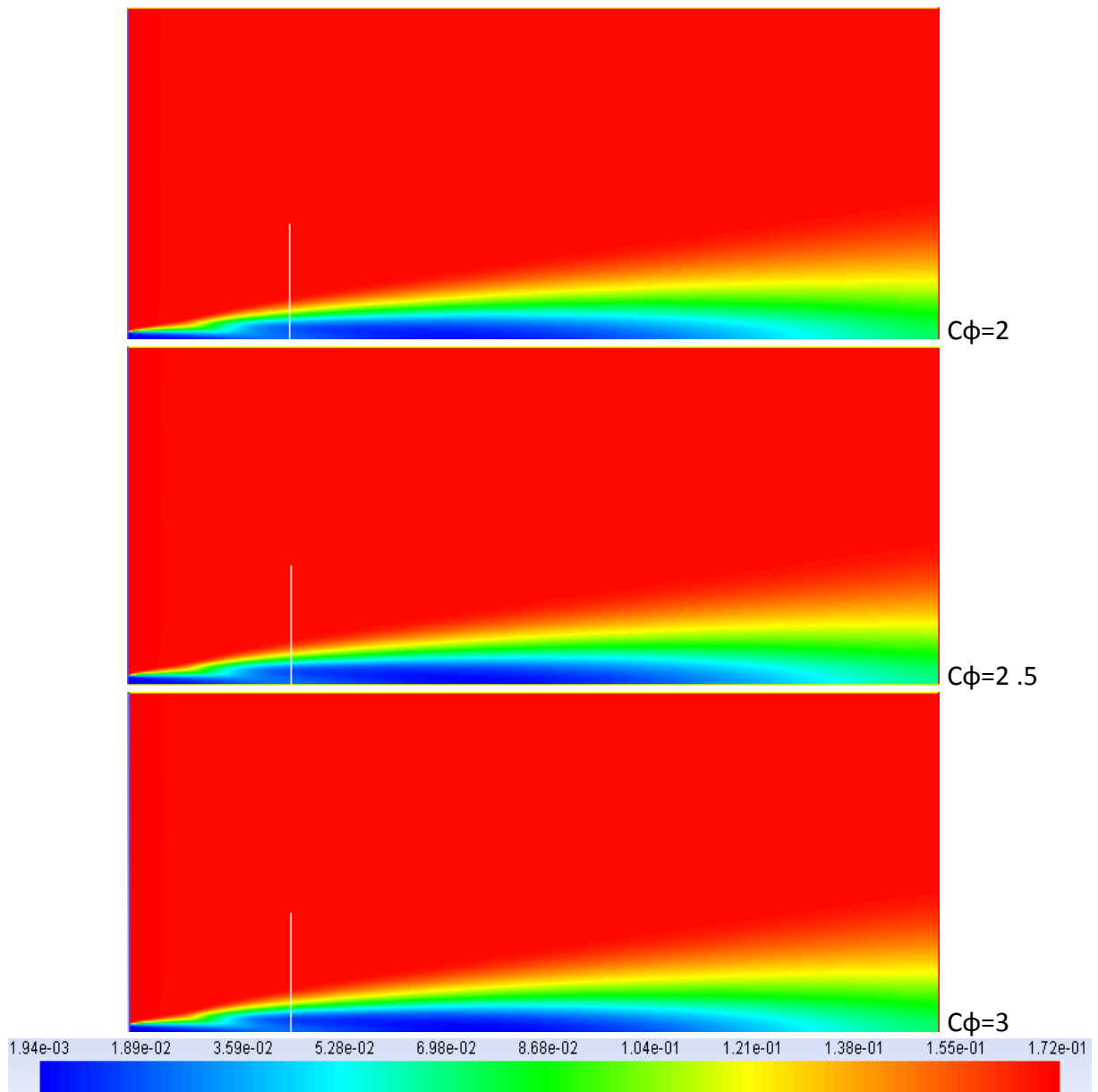
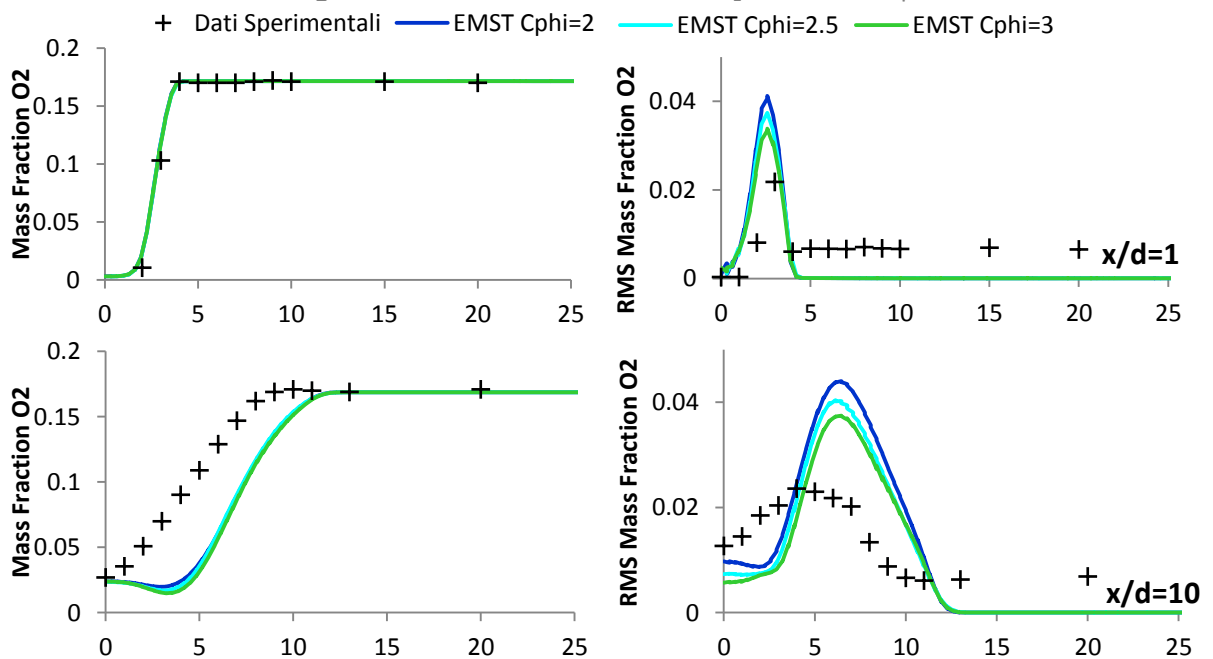


Figura 3.69 Contours frazione massica  $O_2$  al variare di  $C\phi$



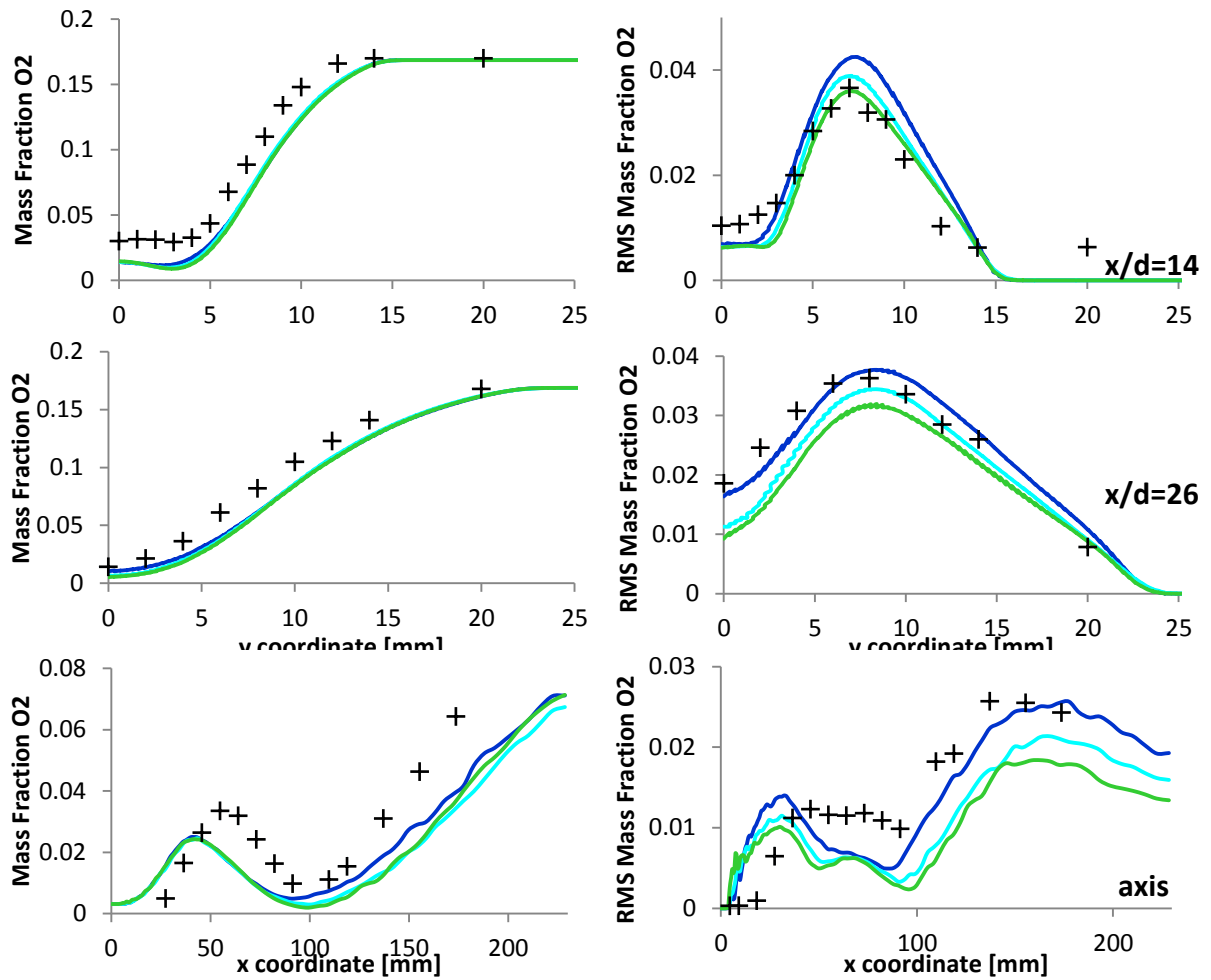
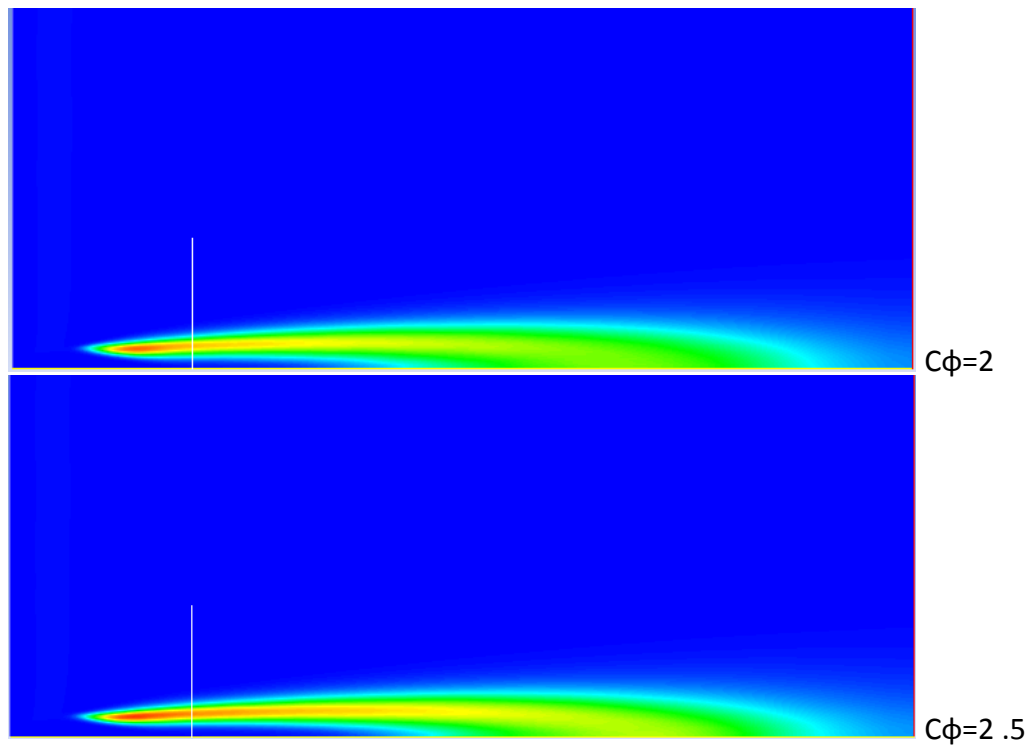
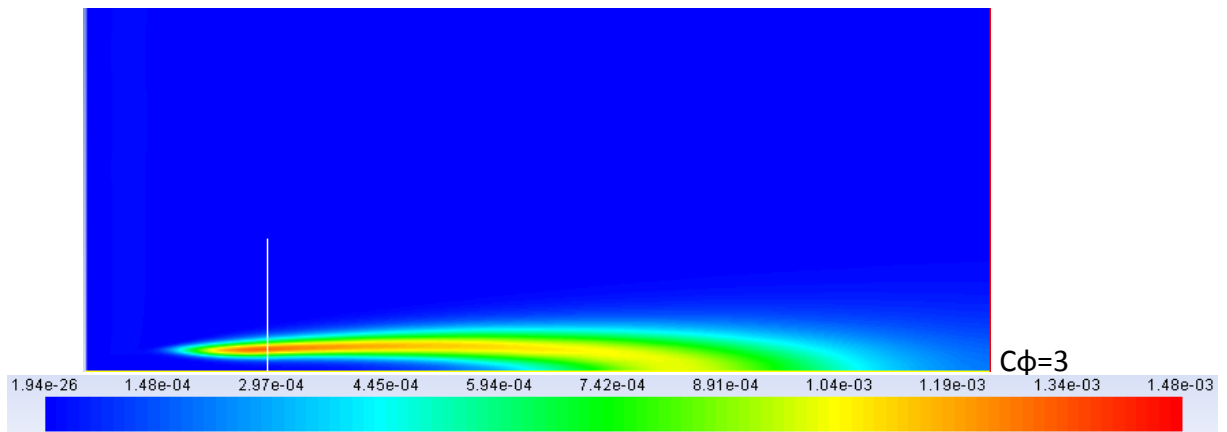
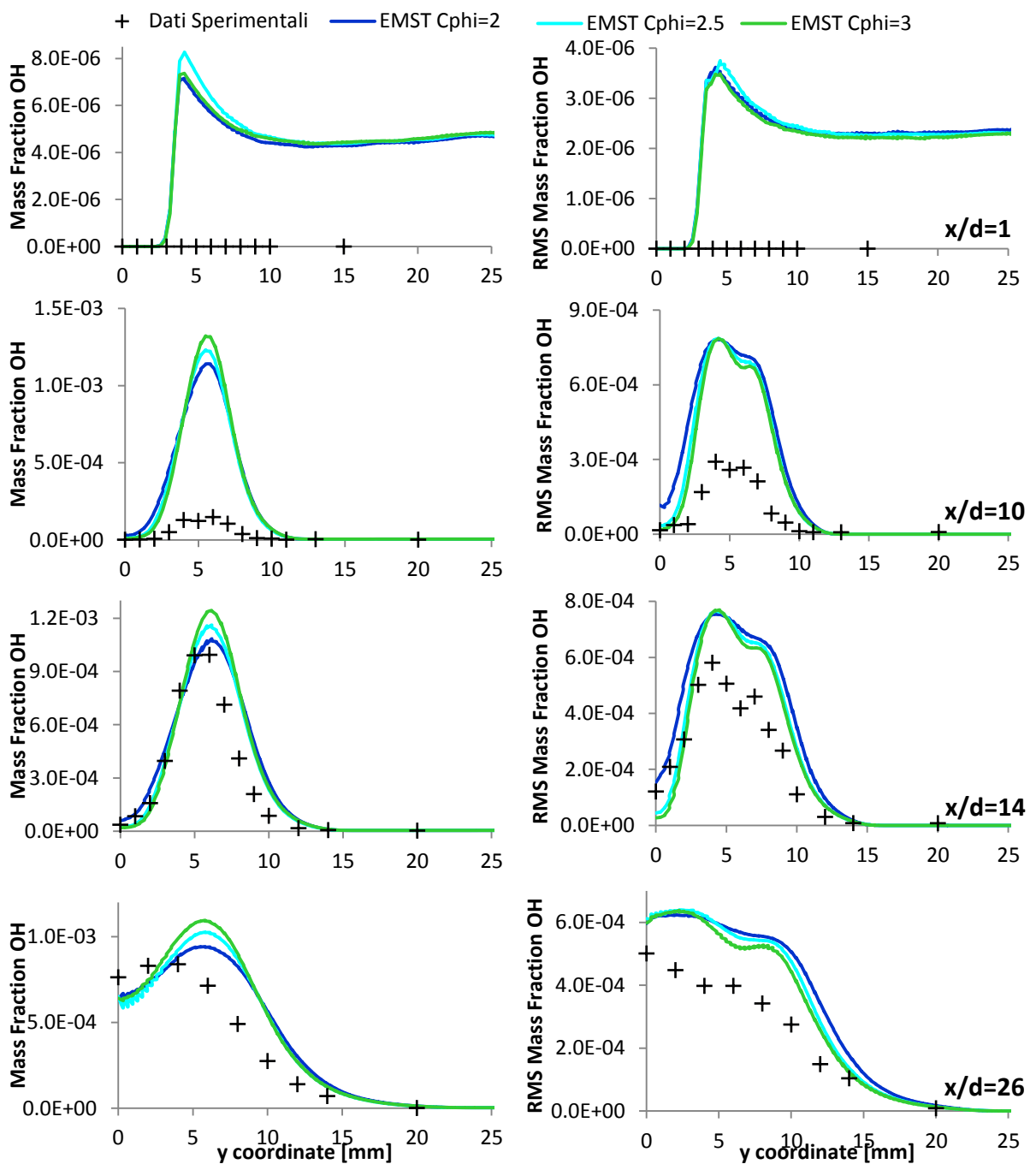


Figura 3.70 Profili frazione massica O<sub>2</sub> al variare di  $C\phi$



Figura 3.71 Contours frazione massica OH al variare di  $C\phi$ 

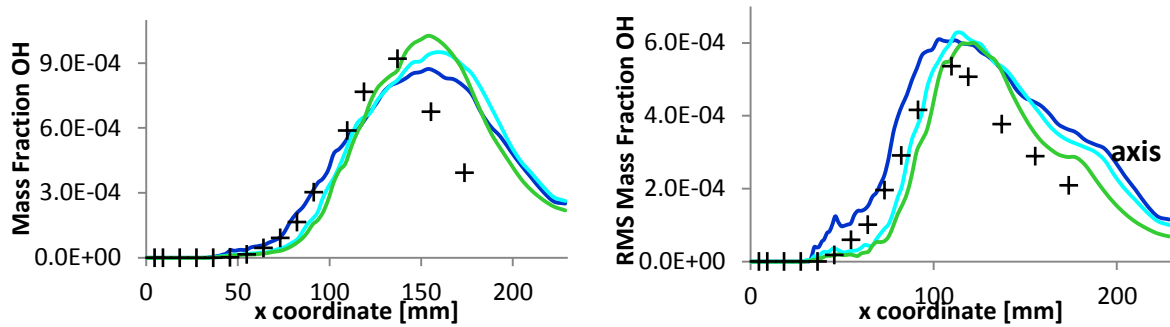
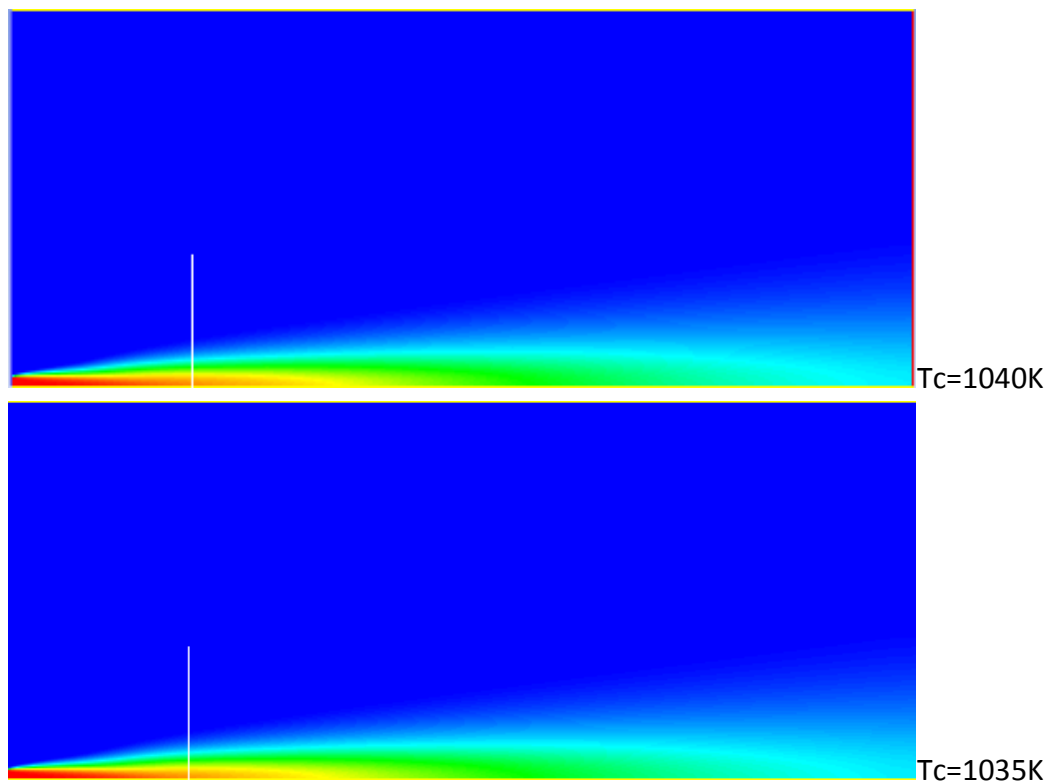


Figura 3.72 Profili frazione massica Oh al variare di  $C\phi$

### 3.2.3 Effetto temperatura del coflow

Il valore della temperatura della corrente di coflow è spesso utilizzata come parametro di tuning per ottenere l'altezza di sollevamento desiderata. I contorni della frazione di miscela in Figura 3.73 mostrano leggere differenze, così come i relativi profili (Figura 3.74), mentre le distribuzioni della temperatura mostrano un leggero spostamento verso valle della base della fiamma nel caso della temperatura minore del coflow (Figura 3.75 e Figura 3.76).

Dalle successive osservazioni dei contorni, dei profili delle frazioni massiche e dei relativi valori efficaci delle specie minori (dalla Figura 3.77 alla Figura 3.80) si nota che per una temperatura del coflow pari a 1030K si ottiene il miglior accordo anche alla luce delle variazioni quadratiche medie.



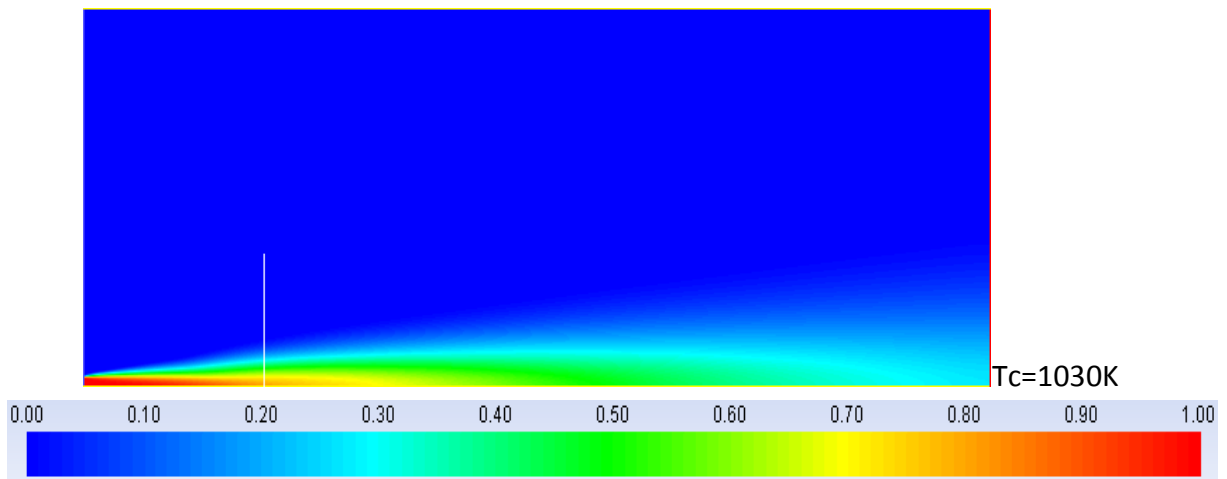
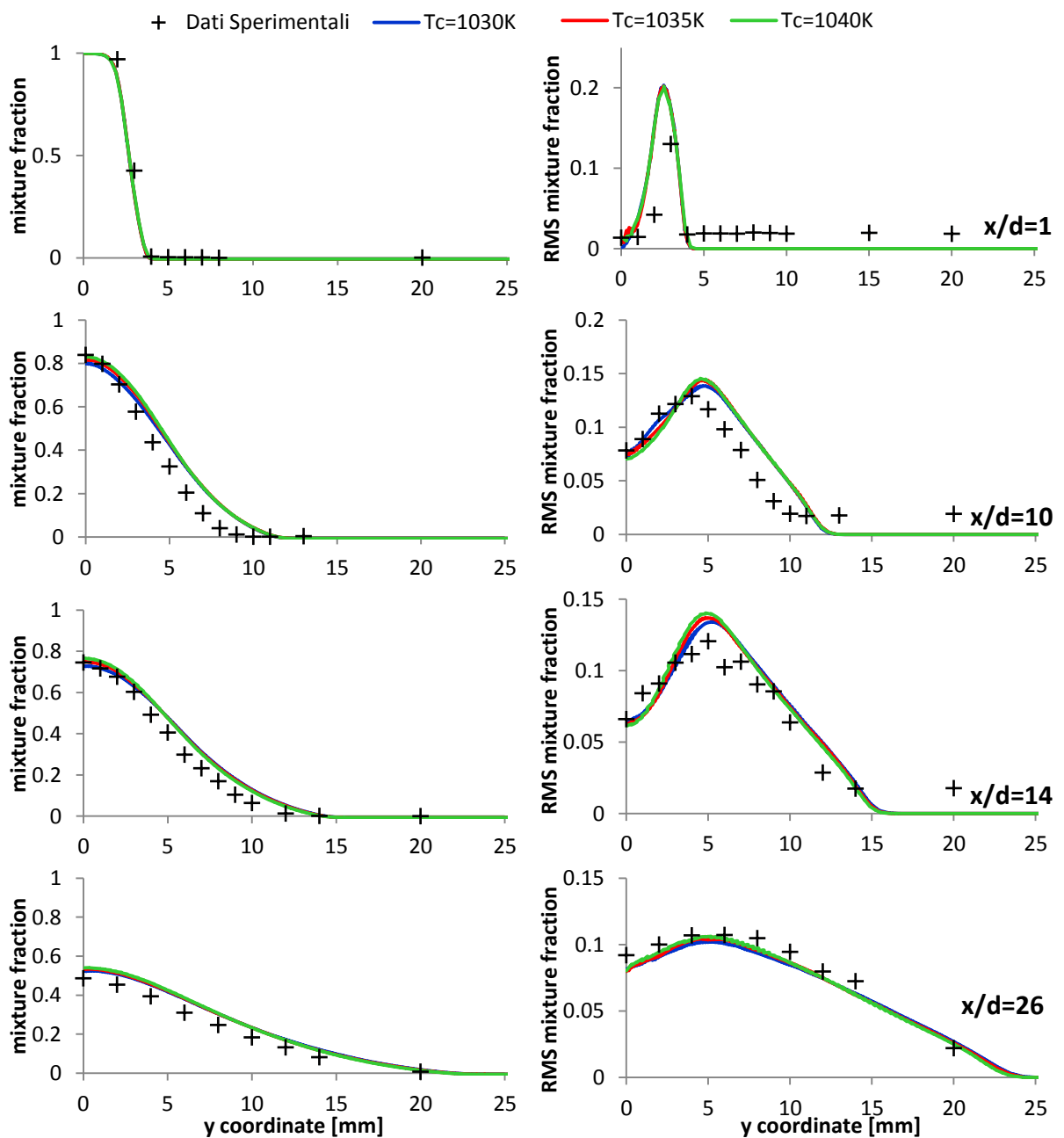


Figura 3.73 Contours della *mixture fraction* al variare della temperatura del coflow



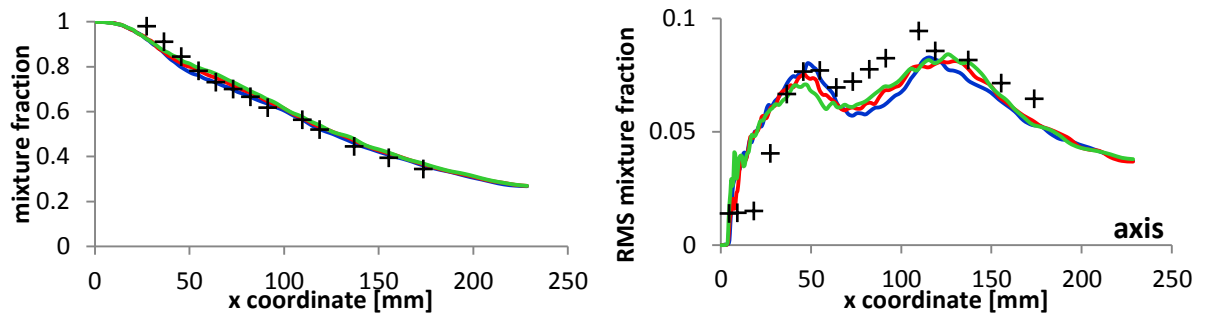


Figura 3.74 Profili della *mixture fraction* al variare della temperatura del coflow

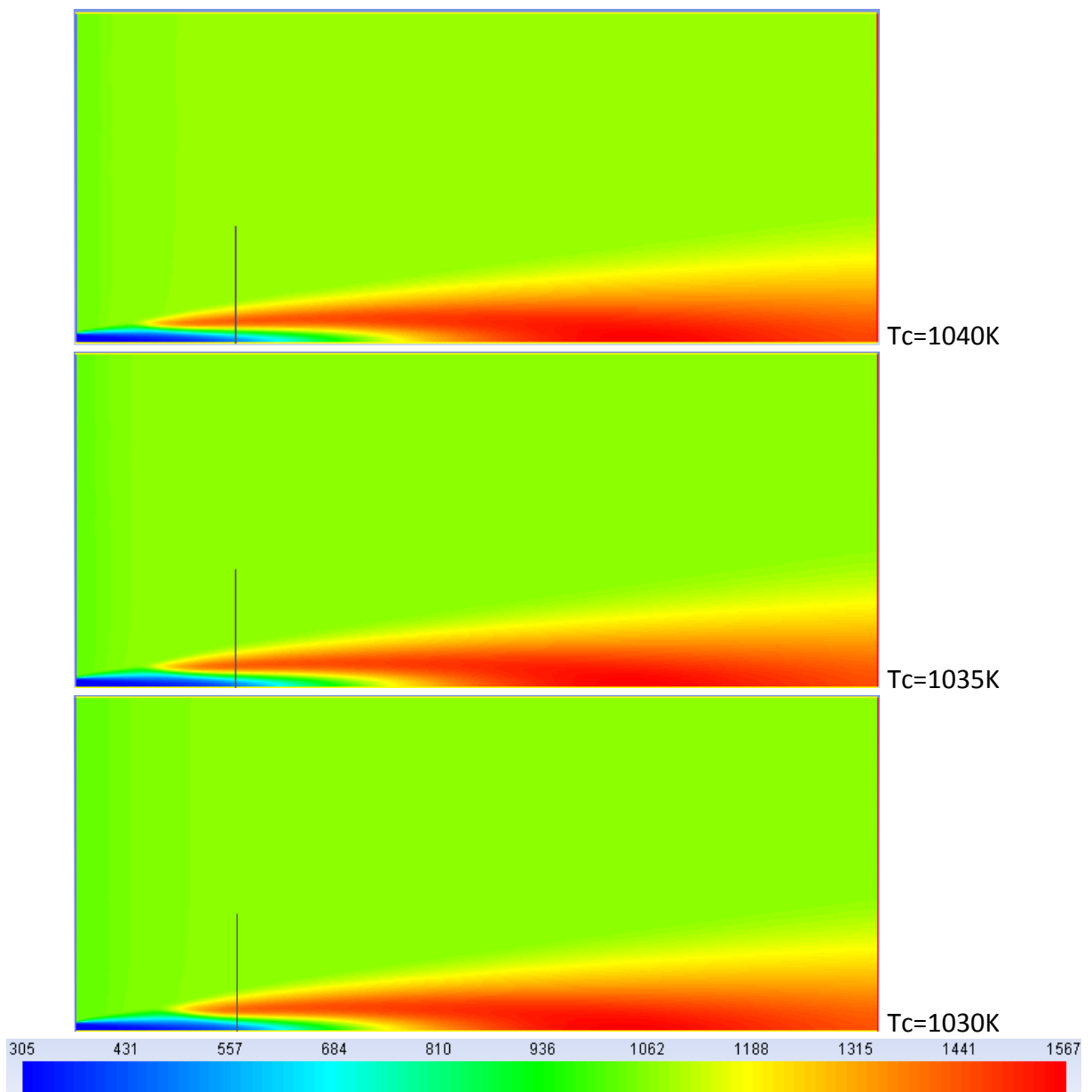


Figura 3.75 Contours temperatura al variare della temperatura del coflow



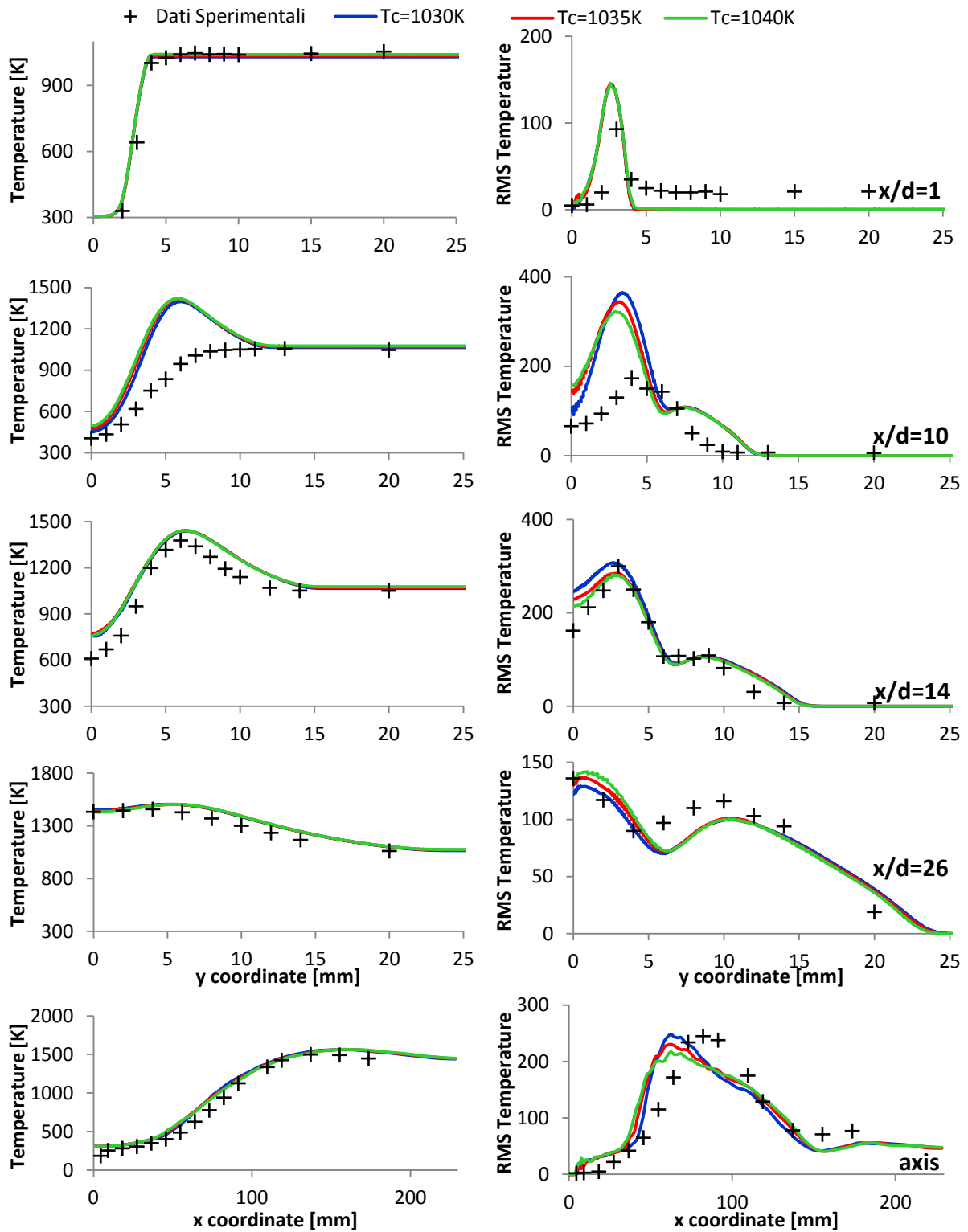


Figura 3.76 Profili temperatura al variare della temperatura del coflow

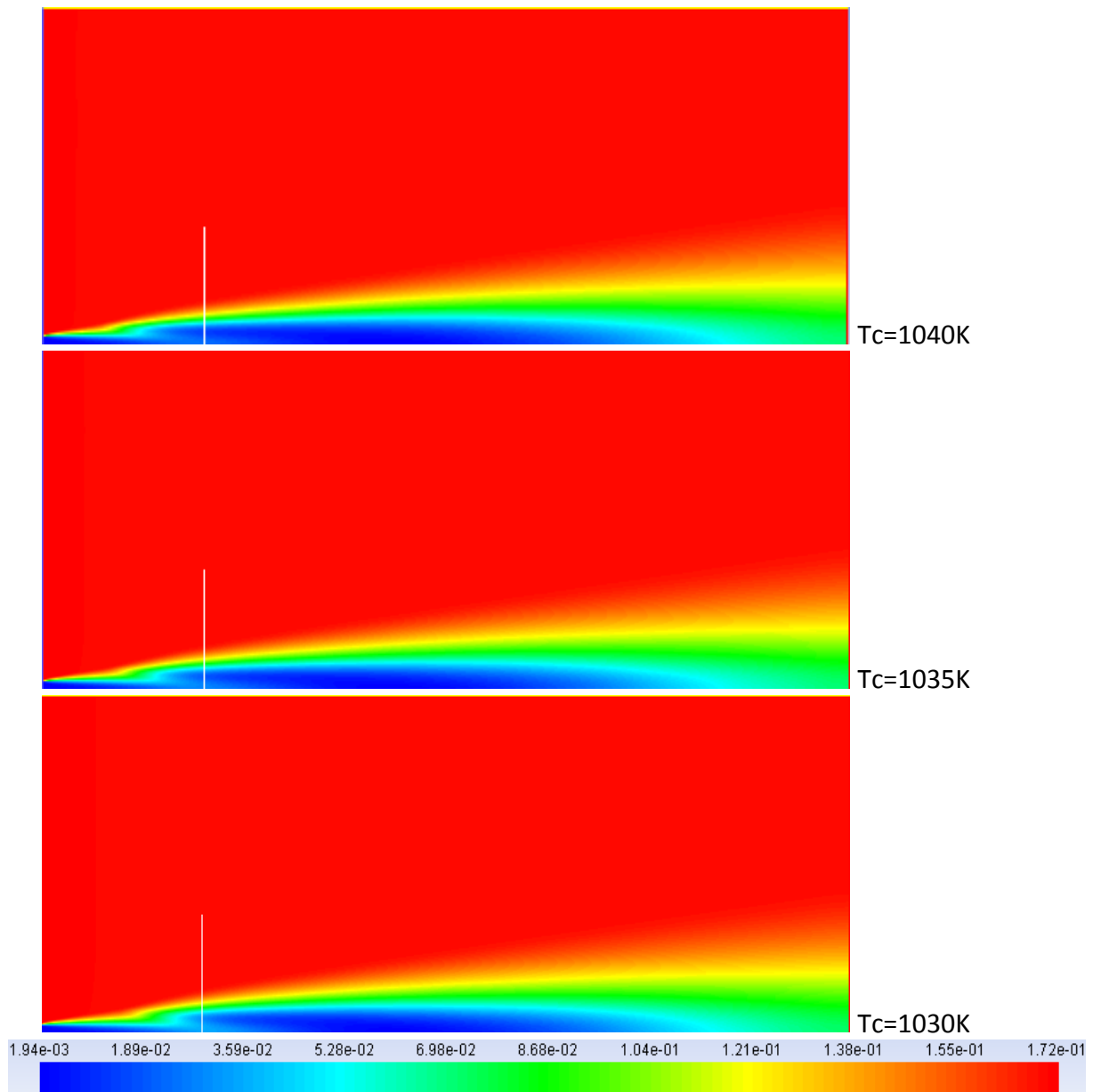
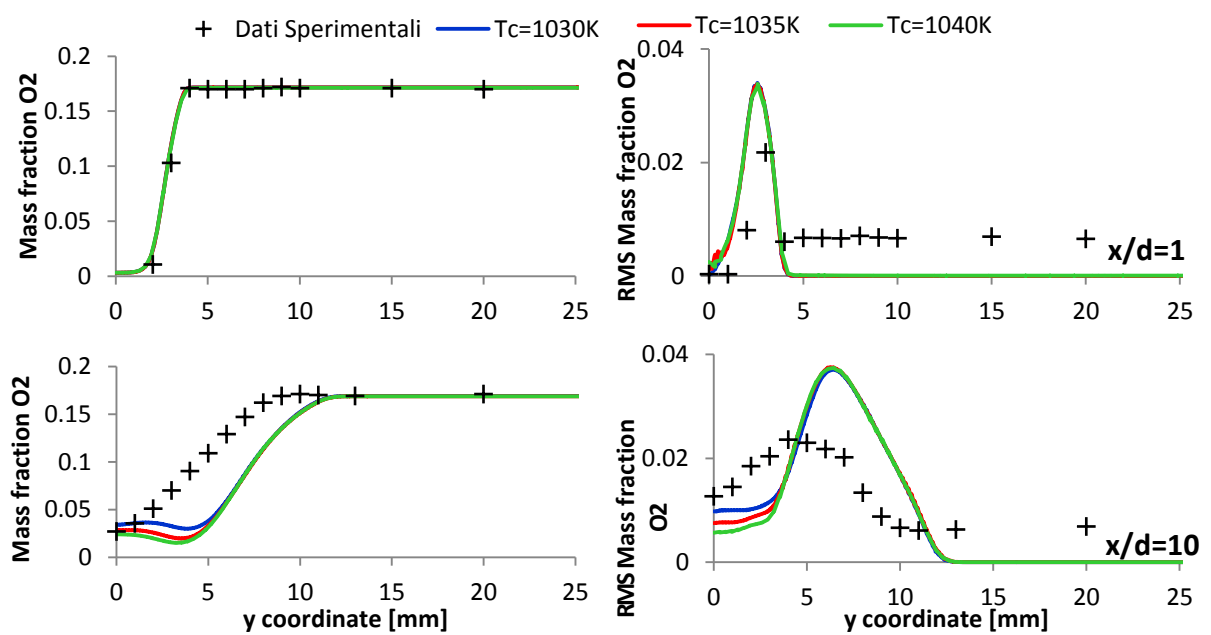


Figura 3.77 Contours frazione massica O<sub>2</sub> al variare della temperatura del coflow



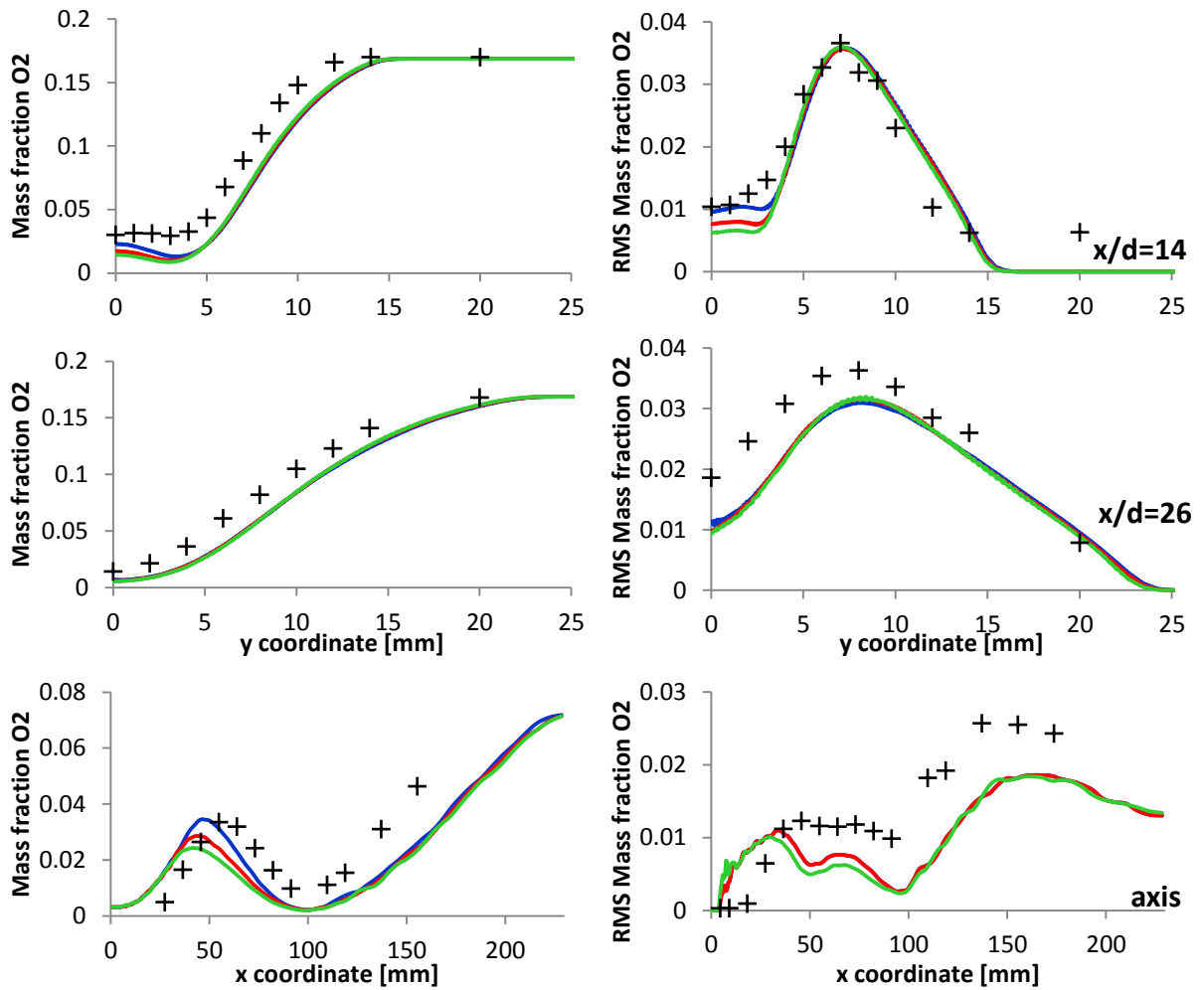
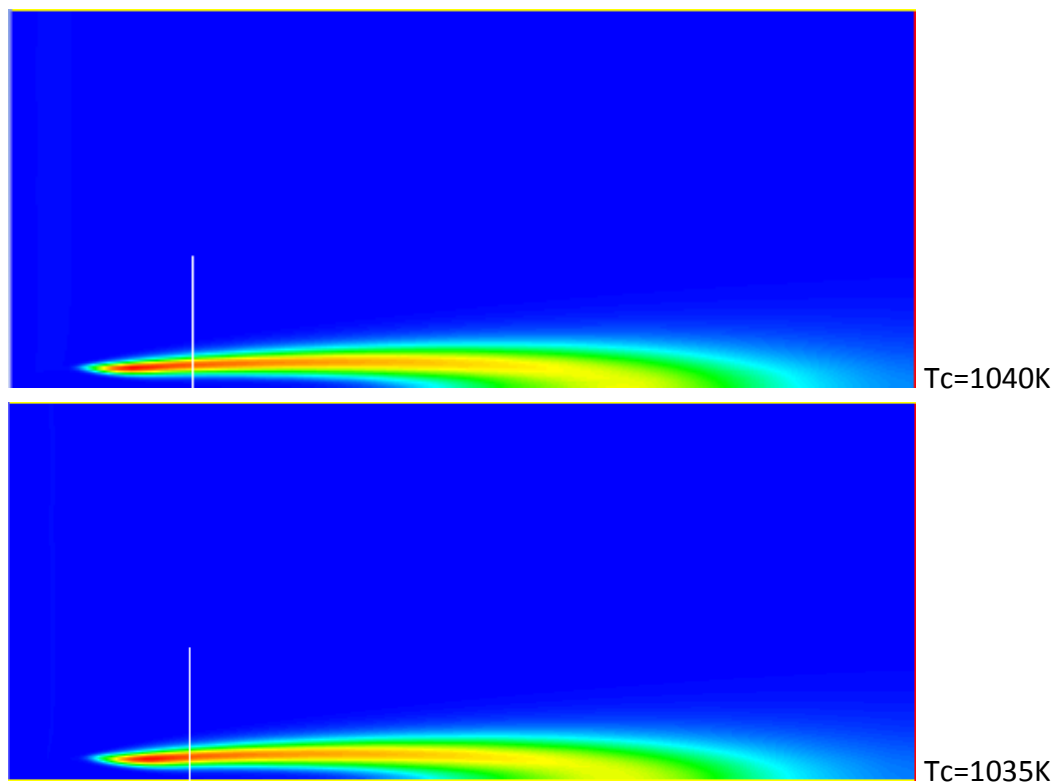


Figura 3.78 Profili frazione massica  $O_2$  al variare della temperatura del coflow



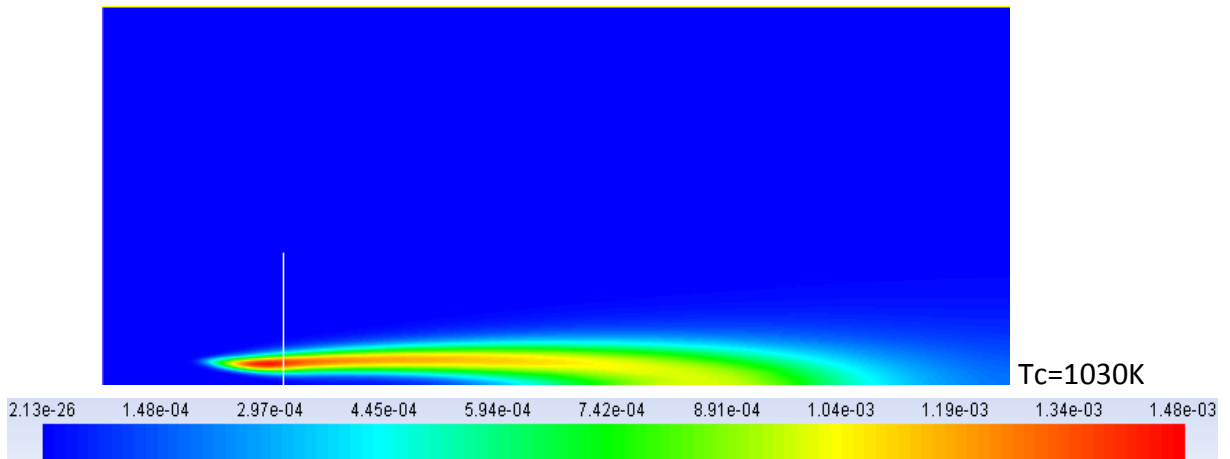
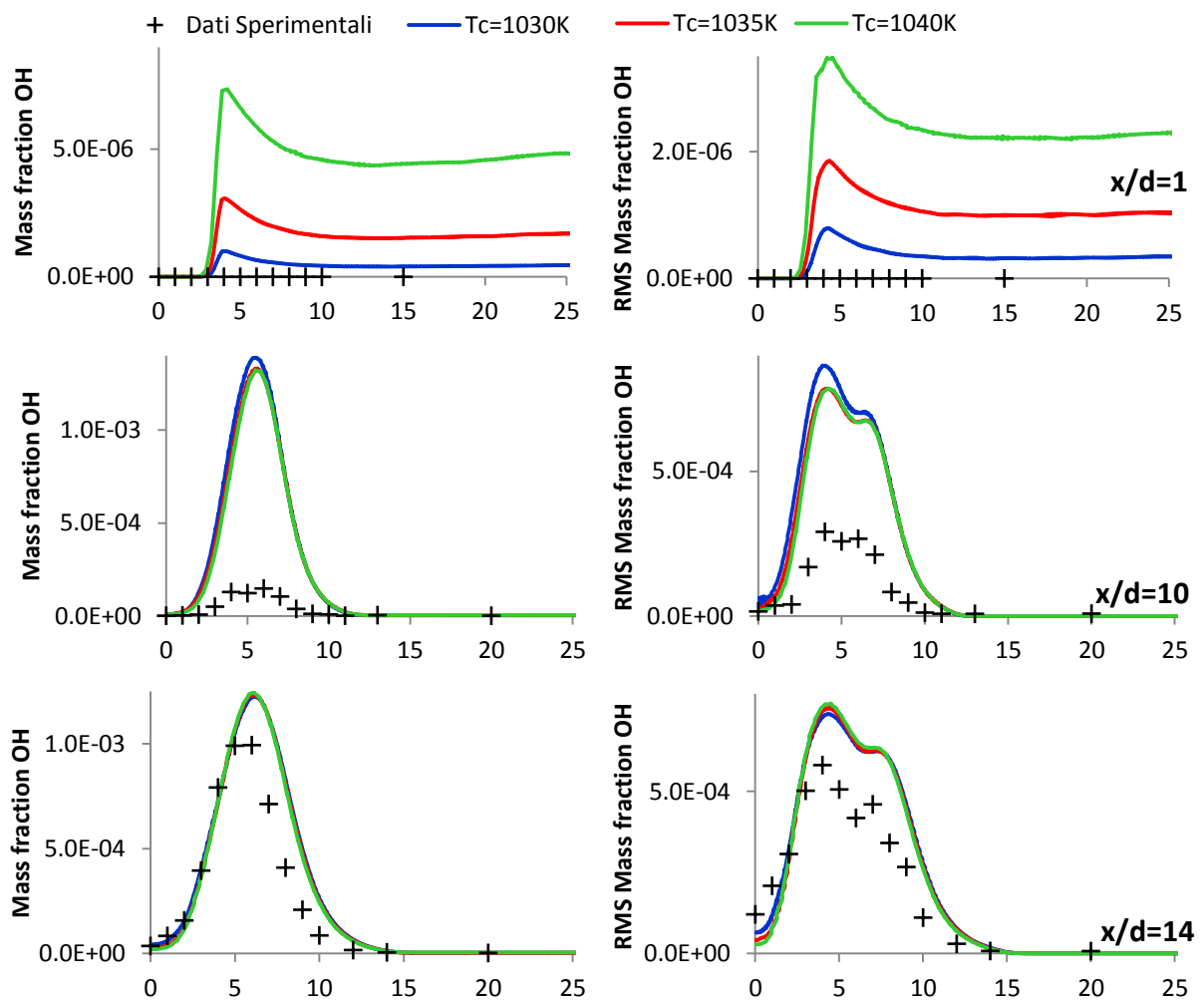


Figura 3.79 Contours frazione massica OH al variare della temperatura del coflow



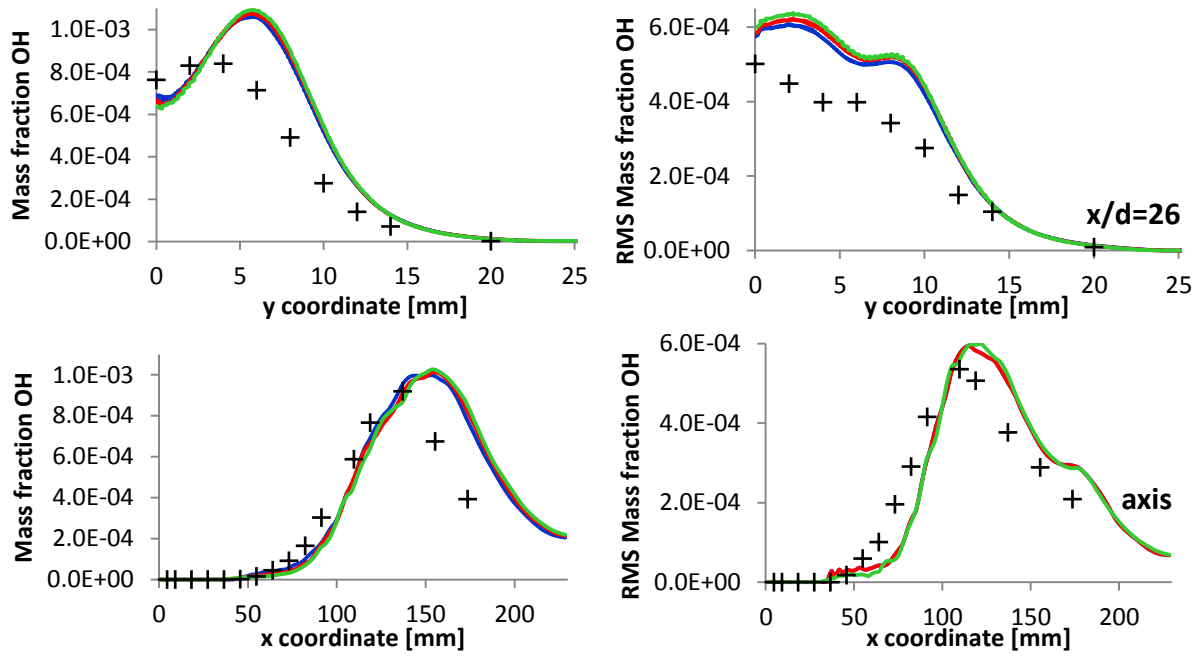


Figura 3.80 Profili frazione massica OH al variare della temperatura del coflow

---

## 4 Conclusioni

Nel presente lavoro di tesi è stata effettuata la modellazione di una fiamma turbolenta di tipo *lifted* alimentata ad idrogeno con coflow di gas combustibili, di interesse per la caratterizzazione della combustione di flussi turbolenti che sono tipici della pratica industriale. Tale fiamma, totalmente caratterizzata in letteratura tramite misure di temperatura e specie chimiche, permette di approfondire concetti fondamentali per la progettazione di un bruciatore quali il meccanismo di stabilizzazione e il ruolo della cinetica chimica.

Lo studio fondamentale eseguito è stato rivolto soprattutto alla descrizione delle cinetiche chimiche e del trattamento dell'interazione tra chimica e turbolenza.

Il modello di interazione tra cinetica chimica e turbolenza Eddy Dissipation Concept (EDC) sembra essere più adatto rispetto ai modelli ED/FR ed EDM, per la caratterizzazione di questo tipo di fiamma, soprattutto per la capacità del modello di incorporare cinetiche chimiche dettagliate. Quindi tale modello è da preferire ai modelli che invece sono comunemente utilizzati nella pratica industriale, quali il modello a cinetica chimica infinitamente veloce Eddy Dissipation EDM e anche la correzione di quest'ultimo secondo Arrhenius sulla quale è basato il modello Eddy Dissipation/Finite Rate appare sufficiente.

Notevole influenza sui risultati delle simulazioni è data dallo schema cinetico considerato. In particolare i meccanismi globali mostrano delle temperature troppo elevate, mentre migliori predizioni si ottengono con i meccanismi dettagliati, anche se il punto di ignizione è largamente sovrastimato. I modelli San Diego e San Diego skeletal hanno dato risultati congruenti confermando che il secondo modello può essere usato senza perdita di accuratezza per il caso in esame.

Per quanto riguarda la turbolenza, il modello più adatto pare essere il  $k-\epsilon$  con  $C_{\epsilon 1} = 1.6$  suggerito per getti. Il valore di ottimo del numero di Schmidt di 0.9 rientra all'interno del range riscontrato anche in letteratura. Un effetto considerevole è stato notato per quanto riguarda la diffusione molecolare; tale punto merita ulteriori approfondimenti.

Per quanto riguarda i modelli PDF transport, che risultano essere abbastanza onerosi dal punto di vista computazionale, è stato evidenziato come un miglioramento delle predizioni possa essere ottenuto attraverso una modifica della temperatura della corrente del coflow, che si rivela quindi essere un parametro di tuning.

All'interno dell'approccio PDF, l'analisi dei valori efficaci RMS delle grandezze ha permesso di cogliere le differenze di predizione dei modelli di miscelamento Modified Curl MCurl e Euclidean Minimum Spanning Tree EMST i cui profili radiali e assiali erano praticamente coincidenti.

Infine, parità di modello EMST la costante di miscelamento  $C\phi$  che ha prodotto i migliori risultati è quella avente valore pari a 3.

Entrambi gli approcci considerati hanno confermato le difficoltà di modellazione di questo tipo di fiamma riscontrate anche in letteratura e in un certo senso spiegano la presenza di una grande quantità di indagini computazionali rivolte in tale campo.

Alla luce di quanto riscontrato nel presente lavoro di tesi, si vede come i modelli utilizzati non producano predizioni accurate e di conseguenza la comprensione dei meccanismi che governano la struttura della fiamma diventa difficoltosa.

Esiste la necessità di ulteriori analisi rivolte a valutare l'influenza dell'incertezza sperimentale sulle condizioni al contorno. Inoltre sarebbe auspicabile lo sviluppo di approcci più complessi quali quelli basati sulle Large Eddy Simulation.

---

## Appendice 1.

### Richardson Extrapolation

Si riportano i profili delle velocità radiali ottenute dalle tre griglie generate a partire dal dominio della fiamma Cabra seguendo le indicazioni suggerite dal metodo di estrapolazione di Richardson per la verifica dell'indipendenza della griglia per cui gli intervalli spaziali, e quindi le dimensioni delle celle, devono essere in rapporto

$$r_h = \frac{h_2}{h_1} = 2$$

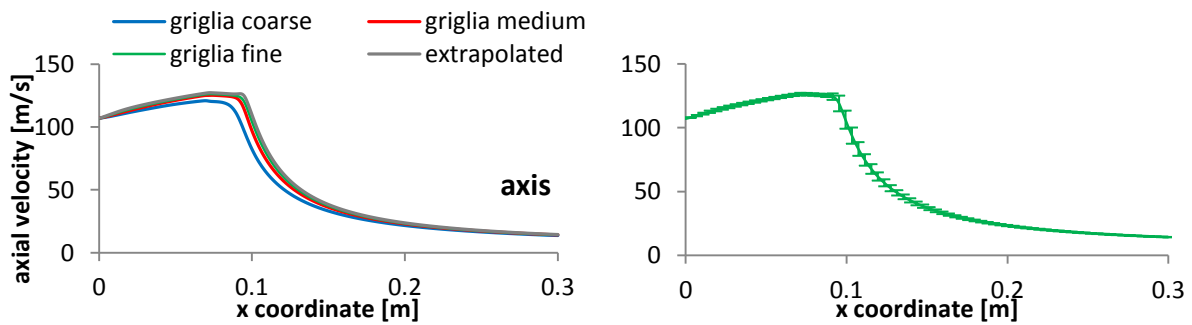
Si ricorda che è stato preso come parametro di riferimento l'edge relativo all'interno dell'ugello e per la griglia *coarse* si è partiti da una divisione di tipo uniforme in 3 celle, per poi passare a 6 celle per la griglia *medium* e infine come ultimo livello di infittimento la griglia *fine* prevede una suddivisione di tale edge in 12 celle.

A fianco dei tre profili è riportato quello ottenuto dall'estrapolazione

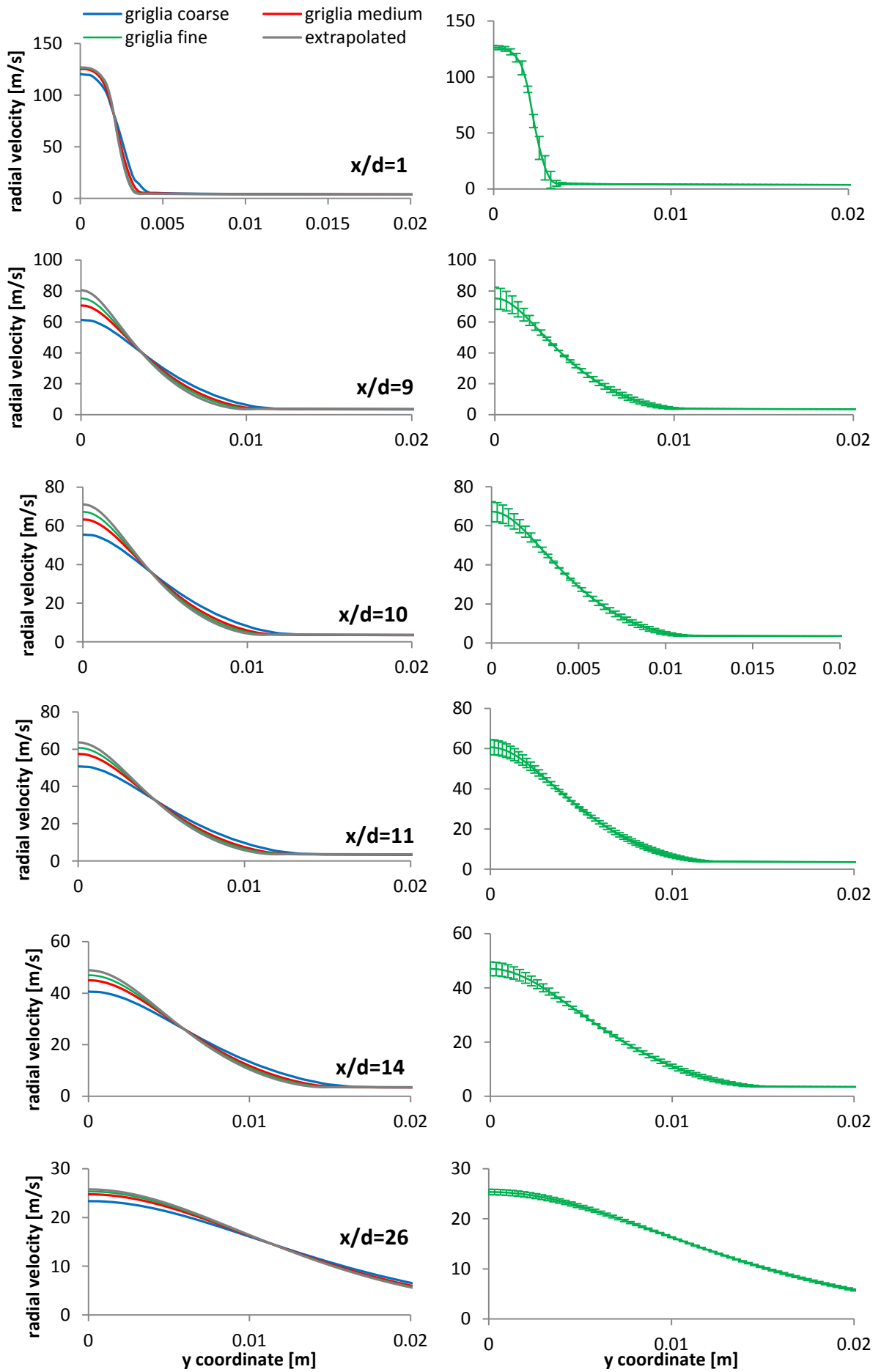
$$\phi_{ext} \cong \phi_1 + \frac{\phi_1 - \phi_2}{r_h^p - 1}$$

È riportato anche l'andamento della velocità per la griglia *fine* con le relative bande di errore calcolate secondo

$$GCI_{fine} = \frac{F_s \cdot |\varepsilon|}{(r^p - 1)}$$







---

## Bibliografia

- [1] D. Y. G. F. Kreith, Handbook of energy efficiency and renewable energy, Taylor & Francis Group, 2007.
- [2] I. Glassman e R. A. Yetter, Combustion, Elsevier, 2008.
- [3] O. O. Owin, Numerical investigation of turbulent hydrogen/air diffusion flames and turbulence radiation interaction, 2011.
- [4] C. Lawn, «Lifted flames on fuel jets in co-flowing air,» *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 35, pp. 1-30, 2009.
- [5] Y. Mizobuchi, S. Tachibana, J. Shinio, S. Ogawa e T. Takeno, «A numerical analysis of the structure of a turbulent hydrogen jet lifted flame,» *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 29, pp. 2009-2015, 2002.
- [6] L. K. Su, O. S. Sun e M. G. Mungal, «Experimental investigation of stabilization mechanisms in turbulent, lifted jet diffusion flames,» *Combustion and Flame*, vol. 144, p. 494-512, 2006.
- [7] R. D. R. Cabra, «Lifted H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> Jet Flame in a Vitiated Coflow,» [Online]. Available: <http://www.me.berkeley.edu/cal/vcb/data/VCHNData.html>.
- [8] T. M. J. Y. C. R. W. D. A. N. K. R. B. R. Cabra, «Simultaneous Laser Raman-Rayleigh-LIF Measurements and Numerical Modeling Results of a Lifted Turbulent N<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> Jet Flame in a Vitiated Coflow,» *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 29, pp. 1881-1888, 2002.
- [9] A. R. Masri, R. Cao, S. B. Pope e G. M. Goldin, «PDF calculations of turbulent lifted flames of H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> fuel issuing into a vitiated coflow,» *Combustion theory and modelling*, vol. 8, pp. 1-22, 2001.
- [10] R. R. Cao, H. Wang e S. B. Pope, «The effect of mixing models in PDF calculations of piloted jet flames,» *Proceedings of the combustion institute*, vol. 31, pp. 1543-1550, 2007.
- [11] H. Wang e S. B. Pope, «Lagrangian investigation of auto-ignition in a hydrogen jet flame in a vitiated coflow: animations of particles trajectories in composition space from PDF model calculations,» 2013.
- [12] S. M. M. Najafizadeh, M. T. Sadeghi, R. Sotudeh-Gharebagh e D. J. Roekaerts, «Chemical structure of autoignition in a turbulent lifted H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> jet flame issuing into a vitiated coflow,» *Combustion and flame*, vol. 160, pp. 2928-2940, 2013.

- 
- [13] S. M. M. Najafizadeh, M. T. Sadeghi e R. Sotudeh-Gharebagh, «Analysis of autoignition of a turbulent lifted H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> jet flame issuing into a vitiated coflow,» *International journal of hydrogen energy*, vol. 38, pp. 2510-2522, 2013.
- [14] Z. Wu, A. R. Masri e R. W. Bilger, «An experimental investigation of the turbulence structure of a lifted H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> jet flame in a vitiated coflow,» *Flow. turbulence and combustion*, vol. 76, pp. 61-81, 2006.
- [15] H. Wang e S. B. Pope, «Lagrangian investigation of local extinction, re-ignition and auto-ignition in turbulent flames,» *Combustion theory and modelling*, vol. 12, n. 5, pp. 857-882, 2008.
- [16] P. J. Roache, «Quantification of uncertainty in computational fluid dynamics,» *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 29, pp. 123-60, 1997.
- [17] J. W. Slater, «Examining Spatial (Grid) Convergence,» in *NPARC Alliance CFD Verification and Validation*, 2008, pp. 1-9.
- [18] J. H. Ferziger e P. Milovan, *Computational methods for fluid dynamics*, Springer, 2002.
- [19] H. K. Versteeg e W. Malalasekera, *An introduction to computational fluid dynamics, the finite volume method*, Harlow: Pearson Education Limited, 2007.
- [20] S. B. Pope, «An explanation of the turbulent round-jet/plane-jet anomaly,» *American institute of aeronautics and astronautics journal*, vol. 16, pp. 279-281, 1978.
- [21] L.-Y. Jiang e I. Campbell, «Prandtl/Schmidt number effect on temperature distribution in a generic combustor,» *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 48, pp. 322-330, 2009.
- [22] Y. Tominaga e T. Stathopoulos, «Turbulent Schmidt numbers for CFD analysis with various types of flowfield,» *Atmospheric Environment*, vol. 41, pp. 8091-8099, 2001.
- [23] J. Li, Z. Zhao, A. Kazakov e F. L. Dryer, «An updated comprehensive kinetic model of hydrogen combustion,» *Int J Chem Kin*, vol. 36, pp. 566-575, 2004.
- [24] I. Stanković e B. Merci, «Analysis of auto-ignition of heated hydrogen/air mixtures with different detailed reaction mechanisms,» *Combustion Theory and Modelling*, vol. 15, p. 409-436, 2011.
- [25] Mechanical and Aerospace Engineering (Combustion Research), «San Diego Mechanism,» University of California at San Diego, 2014. [Online]. Available: <http://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.html>. [Consultato il giorno 2014].
- [26] P. Boivin, C. Jiménez, A. L. Sanchez e F. A. Williams, «An explicit reduced mechanism for H<sub>2</sub>–air combustion,» *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 33, p. 517–523, 2011.
- [27] P. Boivin, «Reduced-Kinetic Mechanisms for Hydrogen and Syngas Combustion Including Autoignition,» *Tesis doctoral*, 2011.
- [28] D. Veynante e L. Vervish, «Turbulent combustion modelling,» *Progress in Energy and*
-

*Combustion Sciences*, vol. 28, pp. 193-266, 2002.

- [29] B. F. Magnussen, «On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow,» *19th American Institute of Aeronautics and Astronautics Aerospace Science meeting*, pp. 1-6, 1981.
- [30] «International workshop on measurement and computation of turbulent non premixed flames,» Sandia national laboratories, [Online]. Available: <http://www.ca.sandia.gov/TNF/mixing.html>.
- [31] K. M. Lyons, «Toward an understanding of the stabilization mechanisms of lifted turbulent jet flames: Experiments,» *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 33, p. 211–231, 2007.
- [32] N. Peters e F. A. Williams, «Lift-off characteristics of turbulent jet diffusion flames,» *Injection and mixing in turbulent flow*, vol. 21, n. 3, pp. 423-429, 1983.